

307.226

IV

25  
1977

# MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

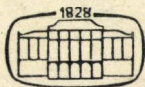
A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA  
III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

KOVÁCS ISTVÁN, NAGY ELEMÉR,  
PÁL LÉNÁRD ÉS SZALAY SÁNDOR  
KÖZREMŰKÖDÉSÉVEL

SZERKESZTI  
JÁNOSSY LAJOS

XXV. KÖTET

1. FÜZET



AKADÉMIAI KIADÓ  
MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA  
BUDAPEST 1977

2



# MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

## A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

KIADÓHIVATAL: 1363 BUDAPEST V., ALKOTMÁNY UTCA 21. SZ.

A Magyar Fizikai Folyóirat a magyar fizikus kutatók lapja. A lap célja a magyar fizikai kutatás korszerű szinten való támogatása, elsősorban összefoglaló jellegű cikkek, tanulmányok stb. közlése által. Ilyen dolgozatok megjelentetésével a lap tájékoztatást kíván nyújtani a fizika különböző kutatási területeinek jelenlegi eredményeiről, problémáiról, további célkitűzéseiről. A lap „A klaszszikus irodalomból” című rovatában rendszeresen közöl egy-egy téma köré csoportosított, immár klasszikussá vált cikkeket, amelyek a témakör befejezése, átlagosan 10—10 dolgozat megjelenése után a folyóiratfüzetekről levalasztva, az alsó lapszámozás szerint összekötve, önálló köteteket képeznek. A folyóiratban évenként egy kötet jelenik meg hat füzetben, füzetenként átlag 6 ív terjedelemben.

A kéziratok a következő címre küldendőek:

Jánossy Lajos akadémikus  
1121 Budapest XII., Konkoly Thege út  
Központi Fizikai Kutató Intézet

Ugyanerre a címre küldendő minden szerkesztőségi levelezés.

A közlésre el nem fogadott kéziratokat a szerkesztőség lehetőleg visszajuttatja a szerzőkhöz, de felelősséget a beküldött, el nem fogadott kéziratok megőrzéséért vagy továbbításáért nem vállal.

A folyóirat előfizetési ára kötetenként 48 Ft. Belföldi megrendelések az Akadémiai Kiadó, 1363 Budapest V., Alkotmány utca 21. (pénzforgalmi jelzőszámunk 215-11 488), külföldi megrendelések a „Kultúra” Könyv- és Hírlap Külkereskedelmi Vállalat, 1389 Budapest I., Fő utca 32. (pénzforgalmi jelzőszám: 218-10 990) útján eszközölhetők.

A kéziratokkal kapcsolatban a szerkesztőség a következőket kéri a szerzőktől:

1. A dolgozat elé rövid tartalmú ismertetőt írjanak.
2. A levezetéseknek csak a gondolatmenetét és főbb lépéseit közölgék. Ha részletezésre lesz szükség, a szerkesztőség azt külön fogja kérni.
3. A kéziratokat gépelve, egy oldalra írva, 4 cm-es margóval, kettős sorközzel készítsék el.
4. Az ábrákat ceruzával, sima fehér papírra rajzolják. A nyomda számára a rajzok elkészítését, a Kiadó vállalja.
5. Az ábrák alá rövid magyarázószöveget írjanak.
6. A kéziratban az érvényben levő kiadói előírások szerint adjanak szedési útmutatásokat.
7. A szövegben az irodalmi utalásokat szögletes zárójelbe tegyék. Az irodalmi adatok megadásakor a folyóiratban kialakult formát használják.



# FÉNYSZÓRÁS KÉTATOMOS MOLEKULÁKON\*

BERGOU JÁNOS

MTA Központi Fizikai Kutató Intézet, Budapest

## TARTALOM

Bevezetés .....	1
I. Rész: Kétatomos homopoláros molekulák elmélete .....	4
1. §. A Born—Oppenheimer-közelítés .....	4
2. §. Kétatomos molekulák elektronenergiatermjei B—O közelítésben .....	8
3. §. A molekularezgések kvalitatív értelmezése .....	10
4. §. A rotációs spektrum .....	11
5. §. A kétatomos molekulák vibrációinak leírása modellpotenciállal .....	15
II. Rész: Fényszórás kétatomos molekulákon .....	20
6. §. A szórási tenzor .....	20
7. §. A hatáskeresztmetszet szög- és polarizációfüggése, szimmetriatulajdonságok .....	22
8. §. A $t_{ik}$ tenzor meghatározásának problémái .....	26
9. §. $H_2^+$ molekulán végbemenő Rayleigh- és Raman-szórás dinamikus $t_{  }$ tenzora .....	28
Összefoglalás és diszkusszió .....	36
Függelék .....	37
Irodalom .....	40

## Bevezetés

A fényszórás a modern fizikai kutatásokban és alkalmazásokban egyaránt helyet kapó témák közül az egyik legrégebben ismert effektus. A fényszórás klasszikus elméletének kidolgozása Rayleighnek az égbolt kék színével foglalkozó munkájával kezdődött [1], nem sokkal a klasszikus elektrodinamika végleges formáját jelentő Maxwell-egyenletek felállítása után. Nagy haladást jelentettek az elmélet fejlődésében *G. Mie* [2] és *P. Debye* [3] munkái, amelyek tetszőleges  $a$  sugarú és optikai paraméterekkel rendelkező, homogén közegbe helyezett homogén gömbökön történő  $\lambda$  hullámhosszúságú fény szórását írták le. Rayleigh elméletéről (amely homogén közeg sűrűségfluktuációin végbemenő fényszórást ír le) kiderült, hogy az a Mie-elméletnek az  $\frac{a}{\lambda} \ll 1$  értékre vett határeset, nagyszámú szórócentrum esetén.

Ebben az esetben általában a szórt fény intenzitása a hullámhossz negyedik hatványával fordítottan arányos ( $I \sim \lambda^{-4}$ ), és az arányossági tényező az adott anyagra jellemző, csak igen gyengén függ  $\lambda$ -tól. Már *Debye* megmutatta azonban, hogy ha a szórócentrum nincs nyugalomban a közegben, hanem  $v$  frekvenciával rezeghet is,

\* Érkezett 1975. október 5.



akkor a szórt fényben a  $\lambda$  hullámhosszú komponens mellett megjelenhetnek a  $\lambda' = \lambda \pm \frac{v}{c}$  hullámhosszú komponensek is. Ezekre is fennáll, hogy  $I' \sim \lambda'^{-4}$ , de az arányossági tényező általában jóval kisebb, mint a beesővel megegyező hullámhosszú szórt fény esetén. *Debye* ezt még csak a szórócentrum elektromágneses rezgéseire mutatta ki, *Smekal* azonban megmutatta, hogy a szórócentrum mechanikai rezgéseire is érvényes. Ezt a jelenséget, amelyet *Raman és munkatársai* 1928-ban fedeztek fel, Raman-effektusnak nevezik [4]. A fényszórás klasszikus elmélete ma már teljesen kidolgozott és számos gyakorlati alkalmazást is nyert (l. pl. [5] és [6]).

A kvantummechanika és különösen a kvantumelektrodinamika kidolgozásával párhuzamosan a fényszórás elmélete is újabb fejlődésnek indult. Kidolgozták az atomok és molekulák elméletét és ennek során kiderült, hogy pl. a molekulákban a molekula rezgéséből és forgásából származó átmenetekhez tartozó frekvenciák a spektrum infravörös és távoli infravörös részébe esnek [7]. Ezek megfigyelése az infravörös spektroszkópia módszereivel nehézkes volt, éppen ebből a szempontból jelentett nagy haladást a Raman-effektus felfedezése, mert lehetővé tette, hogy a spektrumnak ezt a távoli részét is az optikai spektrumra kidolgozott módszerekkel vizsgálják. A Rayleigh- és Raman-szórás kvantumelméleti leírása hosszú ideig az intenzitás-arányok, ill. kiválasztási szabályok leírására korlátozódott [8], [9]. A különböző szimmetriatulajdonságokkal rendelkező molekulákra nézve a kiválasztási szabályok, ill. intenzitásarányok a molekula szimmetriájától függenek. A fényszórás szimmetriatulajdonságainak általános elvekből történő levezetése megtalálható pl. [10]-ben, különböző polarizációjú és koherenciafokú beeső fény esetére.

A molekulafizika kvantitatív kidolgozása elsősorban a legegyszerűbb, azaz a kétatomos molekulák kvantitatív leírásával kezdődött. Ezen belül a  $H_2$ , ill. a  $H_2^+$  mint legegyszerűbb molekula elektronenergiáját (1.1. és 2. §) és egyéb paramétereit határozták meg a legteljesebben és a kísérletekkel teljes összhangban [11]. A  $H_2$  molekula elektronszerkezetére vonatkozó kvantitatív adatok [12] és [13]-ban találhatóak meg. Mindezen kvantitatív adatok elvben már elegendők ahhoz, hogy a molekuláris fényszórásnak ne csak az intenzitásviszonyait, hanem az abszolút értékét is meghatározzuk. Megbízható adat azonban a szórt fény intenzitásának abszolút értékére, mint az a 8. és 9. § elején található rövid irodalmi áttekintés alapján kiderül — nincs, aminek az az oka, hogy még abban az esetben is, ha a molekula elektronállapotát teljesen ismerjük, a molekula egyéb szabadsági fokainak (vibráció és rotáció) a meghatározása elég nehéz.

A fényszórás jelenségkörének problematikáját azonban nemcsak a szóró anyag felől közelíthetjük meg, hanem a szóródó fény felől is. Mindaddig, amíg igen nagy intenzitású, monokromatikus, koherens és tetszőlegesen polarizált fényt kibocsátó fényforrás nem állt rendelkezésre, az abszolút intenzitásadatok iránti igény nem volt túlságosan sürgető. Részben ez is indokolja az elméleti adatok hiányát ezen a téren. A lézerek megjelenésével azonban ez a helyzet gyökeresen megváltozott, ugyanis megjelent az a fényforrás, amely egy hullámhosszon elegendően nagy intenzitású fényt bocsát ki ahhoz, hogy abszolút értékek is mérhetők legyenek. A lézereknek a 60-as évek közepétől számított elterjedésétől kezdve a Raman-spektroszkópia megújult és a publikációk száma az eltelt tíz év alatt már több, mint az azt megelőző negyven évben [14]. A fejlődés nemcsak mennyiségi, hanem minőségi is, és a jelenlegi lézerintenzitások mellett az abszolút mérések elvégzése már reális program.



Mindezek alapján tehát megfogalmazhatók azok a célkitűzések, amelyeket egy elméleti munkának az adott tárgykörben — a jelenlegi elméleti és kísérleti adatok fényében — teljesítenie kell. Mindenekelőtt világos, hogy kvantitatív eredmények viszonylag egyszerű, analitikus számításból csak a legegyszerűbb molekulákra várhatók. Tehát kétatomos molekulák esetén, ismertnek tételezve fel az elektronállapot tulajdonságait (energia, hullámfüggvény, elektronállapotok közti átmeneti mátrixelemek) és ezen kívül csak a molekula szimmetriatulajdonságait feltéve (axiálszimmetria), meghatározandók a molekula lehetséges vibrációs és rotációs állapotai, majd ezek segítségével a molekuláris fényeszórás esetén a szórt intenzitás numerikus értéke mint a szórási szög, a beeső és szórt fény polarizációjának, valamint a frekvenciának függvénye. Ehhez egy adott  $\theta$  és  $\varphi$  irány körül  $d\Omega$  térszögbe szórt  $dI'$  intenzitást állítsunk elő a következő alakban:  $dI' = \sigma \frac{\omega'}{\omega} Id\Omega$ ; ahol  $I$  a beeső

intenzitás,  $\omega$ , ill.  $\omega'$  a beeső, ill. a szórt fény frekvenciája, a kifejezés pedig a  $\sigma$  differenciális szórási hatáskeresztmetszet definíciója. Ily módon a szórási kép meghatározását visszavezettük a hatáskeresztmetszet meghatározására. A disszertáció ezt a célkitűzést követi, és felépítése a következő: két részből áll, az első részben a kétatomos molekulák leírásának elvi alapjai (1. § Born—Oppenheimer-közelítés, 2. § Elektrontermek, 3. § Vibrációs állapotok) után a rotációs spektrumot és a rotációs hullámfüggvényt határozzuk meg (4. §). A rotációs hullámfüggvény és a Wigner által bevezetett forgásmátrixok között igen egyszerű a kapcsolat (egy normálási tényezőtől eltekintve megegyeznek), ez az összefüggés a későbbiekben igen hasznosnak bizonyul, mert a Wigner-mátrixok algebrája ismert. Az 5. § a molekularézkések tárgyalására analitikus modellt ismertet. Éppen ez teszi majd a továbbiakban lehetővé a kvantitatív eredmények származtatását. A második rész a szórási hatáskeresztmetszet általános levezetésével kezdődik (6. §). Utána a 4. § eredményei alapján meghatározzuk a hatáskeresztmetszet szög- és polarizációfüggését (7. §). Ennek során a hatáskeresztmetszet meghatározásának problémáját visszavezetjük két független paraméter, a molekula saját koordinátarendszerében értelmezett polarizálhatósági tenzor  $t_{||}$  és  $t_{\perp}$  komponenseinek meghatározására. A 8. §-ban egy konkrét molekulára, a  $H_2^+$ -ra ismertetem az eddigi eredményeket, illetőleg a konkrét számítás végrehajtásának nehézségeit. Ennek során kitűnik az is, milyen típusú számítástól várható, hogy elég széles frekvenciatartományra jó eredményt ad. A 9. §-ban meghatároztam a  $H_2^+$  molekulában lezajló Rayleigh- és Raman-típusú folyamatok egy sorozatára a  $t_{||}$  paramétert, összehasonlítva az irodalomból ismert adatokkal. A disszertációban szereplő eredmények közül részlegesen új a 4. és 5 § (azaz a rotációs és vibrációs termék analitikus meghatározása), és újak tekinthetők a 7., 8. és 9. § eredményei, a 7. § annyiban, hogy tetszőleges tengelyszimmetriát mutató szórórendszer esetére érvényes, a 8. és 9. § pedig általános módszert ad dinamikus polarizálhatóság meghatározására és az irodalomban először közöl a dinamikus (frekvenciafüggő)  $t_{||}$  komponensre vonatkozó kvantitatív adatokat.



## I. RÉSZ

### Kétatomos homopoláros molekulák elmélete

#### 1. §. A Born—Oppenheimer-közelítés

Akár magának a molekulának a kvantummechanikai sajátosságait, akár a molekulának valamely egyéb (pl. fénnel történő) kölcsönhatását vizsgáljuk, mindenképpen atommagokból és elektronokból álló rendszerek elméleti leírása az elsődleges feladatunk. Mivel az atommagok 3—5 nagyságrenddel nehezebbek az elektronoknál, ezért az elektronokhoz viszonyítva átlagosan jóval lassabban mozognak. Éppen ez teszi lehetővé az olyan típusú közelítő számítást, amikor nulladik közelítésben a magok mozgását elhanyagoljuk, azaz az elektronok mozgását nyugvó magok terében vizsgáljuk, és a következő közelítésben a perturbációs számítás módszereivel vesszük figyelembe a magmozgást. Ez az adiabatikus közelítés, illetve első alkalmazóiról a Born—Oppenheimer (B—O)-közelítés [15]. A B—O közelítés alkalmazása molekulákra megtalálható [7]-ben. A speciálisan  $H_2$  és  $H_2^+$ -molekulára vonatkozó részletes B—O számításokat Cohen et al. [16] végezték el. Tetszőleges háromtest feladatra történő általánosítás pedig [17]-ben található. A következőkben egyszerű számítással kövessük végig a közelítés alap gondolatát, illetve azt, hogy numerikus eredmények hogyan származtathatók belőle. Jelöljük az elektronok tömegét  $m$ -mel, a magokét  $M$ -mel, az  $i$ -edik elektron koordinátáit  $r_i$ -vel, a  $j$ -edik magét  $R_j$ -vel, az elektron, ill. magkoordináták összeségét  $r$ , ill.  $R$ -rel. Ekkor a rendszer belső állapotát meghatározó Hamiltoniant a következő alakban vehetjük fel:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_i \frac{\partial^2}{\partial r_i^2} - \frac{\hbar^2}{2M} \sum_j \frac{\partial^2}{\partial R_j^2} + V(r, R), \quad (1.1)$$

ahol az első tag az elektronok kinetikus energiája, a második a magoké,  $V(r, R)$  pedig az összes részecske közötti kölcsönhatás potenciális energiája. Az adiabatikus közelítés mármint azt jelenti, hogy a súlyos részecskék (magok) kinetikus energiáját mint kis perturbációt vizsgálhatjuk, azaz  $H = H_0 + K_M$ , ahol  $H_0 = K_m + V(r, R)$  és  $K_M$  a perturbáció. Ekkor nulladik közelítésben, amikor a nehéz részecskék tömegét végtelennek tételezzük fel, a stacionárius állapotok meghatározása a következő Schrödinger-egyenletre vezet:

$$[H_0 - \varepsilon_n(R)] \varphi_n(r, R) = 0 \quad (1.2)$$

az  $R$ -ek rögzített értékeire. Az  $n$  index a stacionárius állapotot leíró kvantumszámok összessége. Minden ilyen állapotban a rendszer  $\varepsilon_n(R)$  energiája és  $\varphi_n(r, R)$  hullámfüggvénye paraméterként tartalmazza a magok koordinátáit, tehát pl.  $\varphi_n(r, R)$  az elektronok mozgását rögzített vagy végtelenül lassan (adiabatikusan) változó magkoordináta értékeknél írja le. Tegyük fel, hogy ismerjük az (1.2.) egyenlet meg-



oldásait, ekkor a rendszert leíró (1.1) teljes Hamiltonian stacionárius állapotait, azaz a

$$(H-E)\Psi(R, r) = 0 \quad (1.3)$$

Schrödinger-egyenlet megoldásait a  $\varphi_n$   $H_0$ -sajátfüggvények lineáris kombinációjaként írhatjuk fel, de az együtthatók az  $R$  paraméterértékeit tartalmazni fogják:

$$\Psi(R, r) = \sum_n \Phi_n(R) \varphi_n(r, R). \quad (1.4)$$

$\sum_n$  általánosított összegzés, azaz a folytonos spektrum állapotaira integrálás értendő. (1.4)-et (1.3)-ba helyettesítve,  $\varphi_m^*(r, R)$ -rel szorozva és  $r$  szerint integrálva a következő egyenletet kapjuk:

$$[K_M + \varepsilon_m(R) - E] \Phi_m(R) = \sum_n A_{mn} \Phi_n(R), \quad (1.5)$$

ahol a  $A_{mn}$  operátorra

$$A_{mn} = \frac{\hbar^2}{M} \sum_j \int \varphi_m^*(r, R) \frac{\partial}{\partial R_j} \varphi_n(r, R) dr \frac{\partial}{\partial R_i} - \int \varphi_m^*(r, R) K_M \varphi_n(r, R) dr. \quad (1.5a)$$

Az (1.5) egyenletrendszer pontos. Ha az (1.5a) operátor „kicsi”, akkor az egyenletrendszer perturbációszámítással megoldható. A nulladik (adiabatikus) közelítésben az (1.5) egyenletrendszer baloldalát 0-val tesszük egyenlővé, és az egyenletrendszer független egyenletekre esik szét:

$$[K_M + \varepsilon_m(R)] \Phi_{mv}^0(R) = E_{mv}^0 \Phi_{mv}^0 \quad (1.6)$$

az elektronok mindegyik mozgásállapotára, amelyet az  $m$  kvantumszám jellemez. Az egyenletből látható, hogy a magmozgás számára az  $\varepsilon_m(R)$  elektronenergia jelenti a potenciális energiát. Adiabaticus közelítésben tehát az (1.5) egyenletrendszerből meghatározott hullámfüggvény szorzatalakú lesz:

$$\Psi_{mv}(R, r) = \Phi_{mv}^0(R) \varphi_m(r, R), \quad (1.7)$$

azaz az elektronok minden egyes —  $m$  által adott — mozgásállapotához a magok olyan mozgásállapotai tartoznak, amelyek  $v$ -ben különböznek.

Az adiabaticus közelítés nyilván akkor lesz érvényes és használható, amikor az (1.5) pontos egyenletmegoldásai kevésbé térnek el az (1.6) nulladrendű egyenlet megoldásaitól. A perturbációszámítás szokásos módszerével megmutatható, hogy ehhez a következő egyenlőtlenség teljesülése szükséges:  $|\int \varphi_{mv}^{0*}(R) A_{mn}(R) \Phi_{nv'} \cdot (R) dR| \ll |E_{mv}^0 - E_{mv'}^0|$   $m \neq n$  és tetszőleges  $v, v'$  esetén. Hogy ezt az egyenlőtlenséget részletesebben analizálhassuk, foglalkozunk az (1.6) egyenlet megoldásaival. Az  $\varepsilon_m(R)$  potenciális energia az elektronok teljes energiája az  $m$  állapotban, rögzített magtávolság esetén. Jelöljük 0-val a legalacsonyabb energiájú állapotot. Ennek az állapotnak az  $\varepsilon_0(R)$  energiája a  $R$  magkonfigurációk függvénye lesz. Az egyensúlyi magtávolság az  $\varepsilon_0(R)$  minimumából határozható meg. Az  $\varepsilon_0(R)$  függvényt az egyensúlyi konfiguráció körül másodrendig sorbafejtve, és áttérve a dimenziótlan  $\xi_s$  normálkoordinátákra  $\varepsilon_0(R) = \varepsilon_0(R_0) + \frac{1}{2} \sum_s \hbar \omega_{s0} \xi_s^2$ , ahol  $\omega_{s0}$ -ok az egyensúlyi



helyzet körüli normálrezgések frekvenciái. Ha  $K_M$ -ben a rendszernek, mint egésznek a forgását elhanyagoljuk, akkor az (1.6) egyenlet Hamiltonianja a következő alakra hozható:  $K_M + \varepsilon_m(R) \approx \frac{1}{2} \sum_s \hbar \omega_{s0} \left( \xi_s^2 - \frac{\partial^2}{\partial \xi_s^2} \right) + \varepsilon_0$ . Természetesen az elektronoknak egy más  $m$  kvantumszám által meghatározott mozgásállapotában az egyensúlyi helyzet és a normálrezgések frekvenciája is más lesz. Léteznek olyan állapotok, amelyekben az energiaminimum végtelen magtávolságnál érhető el (disszociáló állapot). Itt azonban csak olyan eseteket vizsgálunk, amelyeknél az elektronállapotok közti átmenet csak az egyensúlyi helyzet véges megváltozását és a normálrezgések frekvenciájának változását okozza. Ekkor, ha  $\varepsilon_m(R)$ -et is sorbafejtjük  $\varepsilon_0(R)$  egyensúlyi helyzete,  $R_0$  körül, általában fellepnek elsőrendű tagok is. Ezért kis kitérésekre:

$$K_M + \varepsilon_m(R) \approx \frac{1}{2} \sum_s \hbar \omega_{sm} \left[ (\xi_s - \xi_{sm})^2 - \frac{\partial^2}{\partial \xi_s^2} \right] + \varepsilon_m$$

$m=0$ -ra  $\xi_{sm}=0$ , egyébként  $\xi_{sm}$  az  $m$ -edik és a 0-dik elektronállapot egyensúlyi helyzetének eltérését adja meg. Ennek az átalakításnak a felhasználásával a magok mozgásegyenlete:

$$\left\{ \frac{1}{2} \sum_s \hbar \omega_{sm} \left[ (\xi_s - \xi_{sm})^2 - \frac{\partial^2}{\partial \xi_s^2} \right] - (E_{mv}^0 - \varepsilon_m) \right\} \Phi_{mv} = 0 \quad (1.6a)$$

A fenti egyenlet Hamilton-operátora  $\omega_{sm}$  frekvenciájú harmonikus oszcillátorok Hamiltonianjainak összege. Ily módon a rendszer állapotát adiabatikus közelítésben az  $m$  elektron és a  $v$  vibrációs kvantumszám jellemzi. Ez utóbbi az  $n_s$  kvantumszámok összességét jelöli, ahol  $n_s$  az  $s$  normálrezgésnek megfelelő oszcillátor állapotát mutatja;  $v = n_1, n_2, \dots = \{n_s\}$ . A rendszer energiája az  $m \{n_s\}$  állapotban  $E_{m\{n_s\}} = \varepsilon_m + \sum_s \hbar \omega_{sm} (n_s + 1/2)$ . A megfelelő állapot hullámfüggvénye szorzatalakú, az egyes oszcillátor- és elektronhullám-függvények szorzata:

$$|m \{n_s\}\rangle = \varphi_m(r, R) \prod_s \chi_{n_s}(\xi_s - \xi_{sm}) \quad (1.7a)$$

ahol  $\chi_{n_s}(\xi_s - \xi_{sm})$  az  $s$  típusú,  $\xi_{sm}$  centrumú normálrezgés harmonikus oszcillátorának hullámfüggvénye.

Ezek után áttérhetünk a  $\langle \Phi_{mv}^0 | A_{mn} | \Phi_{nv}^0 \rangle$  mátrixelem kiértékelésére. Mindenekelőtt a  $A_{mn}$  kifejezésben elhanyagoljuk az elektronhullám függvények magkoordináták szerinti második deriváltjait, és feltesszük, hogy  $\omega_{sm} \approx \omega_s$ , ekkor a magmozgás kinetikus energiájának operátora  $K_M \approx -\frac{\hbar}{2} \sum_s \omega_s \frac{\partial^2}{\partial \xi_s^2}$ , amiből,

$$A_{mn} = -\hbar \sum_s \int \varphi_m^*(r, R) \frac{\partial}{\partial \xi_s} \varphi_n(r, R) dR \omega_s \frac{\partial}{\partial \xi_s} = -\hbar \sum_s B_{mn}(s) \omega_s \frac{\partial}{\partial \xi_s} + \dots \quad (1.8)$$

$$\text{ahol a } B_{mn}(s) = \left[ \int \varphi_m^*(r, R) \frac{\partial}{\partial \xi_s} \varphi_n(r, R) dr \right]_{R=R_0} \quad (1.8a)$$

mátrixelem a magok  $s$  típusú normálrezgésének megfelelő helyzetváltoztatását veszi figyelembe az elektronhullámfüggvényre. Felhasználva az impulzusz mátrixelem kife-



jezését harmonikus oszcillátor saját állapotok között, és olyan  $v, v'$  állapotokat választva, melyekre  $n'_\sigma = n_\sigma + 1$  és az összes többi  $n'_s = n_s$ , akkor végül is a következő kifejezést nyerjük a  $A_{mn}$  mátrixelemére:  $\langle \Phi_{mv}^0 | A_{mn} | \Phi_{nv'}^0 \rangle = \hbar \omega_\sigma B_{mn}(\sigma) \frac{n_\sigma + 1}{2} (\xi_{\sigma m} - \xi_{\sigma n})$ ; az adiabatikus közelítés feltétele pedig a következő lesz:

$$|\hbar \omega_\sigma B_{mn}(\sigma) \frac{n_\sigma + 1}{2} (\xi_{\sigma m} - \xi_{\sigma n})| \ll |\varepsilon_m - \varepsilon_n - \hbar \omega_\sigma|. \quad (1.9)$$

Ha pedig a  $v'$  állapot avval különbözik  $v$ -től, hogy  $n'_\sigma = n_\sigma - 1$  és az összes többi  $n'_s = n_s$ , akkor

$$|\hbar \omega_\sigma B_{mn}(\sigma) n_\sigma (\xi_{\sigma m} - \xi_{\sigma n})| \ll |\varepsilon_m - \varepsilon_n + \hbar \omega_\sigma| \quad (1.9a)$$

(1.9) és (1.9a)-ból következik, hogy az adiabatikus közelítés alkalmazhatóságának elégséges feltétele a vibrációs frekvencia kicsiny volta a karakterisztikus elektron-frekvenciákhoz képest, azaz:

$$\hbar \omega_\sigma \ll |\varepsilon_m - \varepsilon_n|. \quad (1.10)$$

Ez a feltétel elégséges, de nem mindig szükséges. Néhány esetben a  $B_{mn}(\sigma)$  és a  $|\xi_{\sigma m} - \xi_{\sigma n}|$ -nek kicsinyisége miatt is teljesül az adiabatikus feltétel, akkor is, ha (1.10) nem áll fenn.

Az adiabatikus közelítés ismertetésének befejezésekképpen végezzünk el egy nagyságrendi becslést a különböző energijárulékokra vonatkozóan. Legyen a molekulára jellemző lineáris méret  $d$ , akkor az elektronok energiája  $\varepsilon \sim \frac{\hbar^2}{md^2}$  nagyságrendű

lesz. A magok rezgési energiája  $E_{\text{vibr}} = \hbar \sqrt{\frac{k}{M}}$ , ahol  $k$  a rugalmassági együttható, a magok kitérésére vonatkozóan. Mivel a magmozgás potenciális energiája az elektronenergia, ezért  $k = \frac{\partial^2 \varepsilon}{\partial R^2} \Big|_{R=R_0} \sim \frac{\varepsilon}{d^2}$ . Így  $E_{\text{vibr}} = \hbar \sqrt{\frac{\varepsilon}{Md^2}} \approx \frac{\hbar^2}{d^2 \sqrt{mM}} \approx \sqrt{\frac{m}{M}} \varepsilon$ .

Számos adiabatikus közelítésben végzett számításnál az (1.7)-ben adott  $\Psi_{mv}$  helyett  $\Psi_{mv}^0 = \Phi_{mv}^0(R) \varphi_m(r, R_0)$ -t használnak, ahol  $R_0$  az egyensúlyi konfiguráció. Ez a közelítés természetesen csak akkor megengedett, ha az egyensúlyi helyzet körüli ún. zérusrezgések amplitúdója jóval kisebb a molekula méreténél. Harmonikus

oszcillátor esetén  $\langle x^2 \rangle \approx \frac{\hbar}{M\omega} = \frac{\hbar^2}{ME_{\text{vibr}}}$ . Ebből  $\eta = \frac{\sqrt{\langle x^2 \rangle}}{d} \approx \left(\frac{m}{M}\right)^{1/4} \ll 1$  a köze-

lítés alkalmazhatósági feltétele. A molekula forgási energiája  $E_{\text{rot}} \approx \frac{\hbar^2}{Md^2} = \frac{m}{M} \frac{\hbar^2}{md^2} \approx$

$\approx \eta^4 \varepsilon$ . Born és Oppenheimer eredeti munkájukban [15] a molekula energiáját a kicsiny  $\eta$  paraméter szerinti sor alakjában adták meg. Ugyanis, mint beláttuk, az elektronok energiája  $\eta$ -ban nulladrendű, a vibrációs energia  $\eta$ -ban másodrendű, a forgási energia  $\eta$ -ban negyedrendű, és az ezek közötti csatolás  $\eta$ -ban még magasabbrendű járulékokat ad, ezért általában elég  $\eta^2$ -ig elmenni. A következőkben áttérünk az egyes energiatermek meghatározásának problémájára, az  $\eta$ -ban nulladrendű elektrontermekkel kezdve.



## 2. §. Kétatomos molekulák elektronenergiatermjei $B-O$ közelítésben

A molekulák elméletében alapvető szerepet játszik az a tény, hogy az atommagok tömege sokkal nagyobb az elektrontömegeknél. Ezért a magmozgás sebessége sokkal kisebb lesz, mint az elektronok sebessége. Ez teszi lehetővé, hogy az elektronmozgást rögzített magok mellett vizsgáljuk. Célszerű tehát az elektronok mozgását olyan  $\xi\eta\zeta$  koordinátarendszerben leírni, amelynek egyik tengelye (pl. a  $\zeta$  tengely) egybeesik a molekulatengellyel, origója a súlypont. Ekkor az elektronhullámfüggvény a  $\xi\eta\zeta$  változóktól függ és a magtávolságot ( $r$ ) paraméterként tartalmazza. A stacionárius elektronállapotok energiája is az  $r$  magtávolság függvénye  $\varepsilon_n(r)$  lesz, ellentétben az atomokkal, ahol egyszerű számok voltak.  $\varepsilon_n(r)$ -be beleértjük a magok Coulomb-energiáját is, így  $\varepsilon_n(r)$  tulajdonképpen a molekula teljes energiája rögzített magok mellett.

Az atomi termek osztályozásánál alapvető szerepet játszik a teljes  $L$  pályamomentum szerinti osztályozás. Ennek feltétele, hogy az atomi tér centrális, kétatomos molekulában azonban az elektronok a két magon áthaladó tengelyre nézve axiálszimmetrikus térben mozognak. Ezért itt csak a pályamomentum tengelyirányú vetülete  $L_\zeta$  megmaradó mennyiség, és ennek értéke szerint osztályozhatók a molekulatermek.  $L_\zeta$  abszolút értékét  $\Lambda$ -val jelöljük ( $\Lambda=0, 1, 2, \dots$ ) és a különböző  $\Lambda=0, 1, 2, \dots$  értékekhez tartozó termeket rendre  $\Sigma$ -,  $\Pi$ -,  $\Delta$ -termeknek nevezzük.

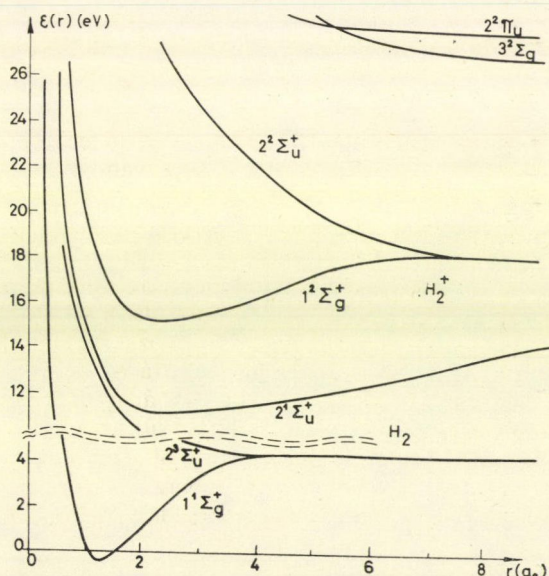
Ezen kívül az egyes elektronállapotokat az elektronok eredő  $S$  spinje is jellemzi. A  $2S+1$  számot az adott elektronterm multiplicitásának nevezzük. (Ez megegyezik az atomi klasszifikációval, így pl.  $S=0, \frac{1}{2}, 1$ -re rendre szinglett, dublett, triplett állapotról beszélünk.) Jele a termszimbólum mellett bal felső indexként a multiplicitás, pl.  $^3\Pi$ .

A molekula szimmetrikus továbbá a tengelyén ( $\zeta$  tengely) áthaladó bármely síkra való tükrözésre, és ekkor csak  $L_\zeta$  előjele változik, de az energia értéke változatlan.  $\Lambda \neq 0$ -ra tehát az elektrontermek kétszeresen elfajultak. A  $\Sigma$  termék nem elfajultak, ezek tükrözésnél csak  $\pm 1$ -gyel szorozódhatnak ( $\Sigma^+$ , ill.  $\Sigma^-$  állapot). Ha a molekula két azonos atomból áll, akkor ez újabb szimmetriát jelent. A kétatomos molekulának ugyanis ekkor lesz szimmetriacentruma, mégpedig a magok tömegközéppontja, ami egybeesik a koordinátarendszer kezdőpontjával. Rögzített magok mellett csak az elektronkoordinátákat tükrözve a Hamiltonian változatlan marad, ezért az adott  $\Lambda$ -jú állapotokat még paritásuk szerint is osztályozhatjuk. Ha a paritás  $+1$ , akkor  $\Lambda_g$ , ha  $-1$ , akkor  $\Lambda_u$  állapotról beszélünk. Empirikus szabályként a legtöbb kétatomos molekulára teljesül az, hogy alapállapotuk teljes szimmetriát mutat, azaz  $^1\Sigma_g$  állapot, ill. ha a magok azonosak, akkor  $^1\Sigma_g^+$  állapot. További jellemzője a molekulaállapotnak az inverzióoperátorral (elektron és magkoordináták egyidejű tükrözése) szembeni viselkedés. Az összes molekulaterm felosztható pozitív és negatív termekre, aszerint, hogy a hullámfüggvény előjele inverzió esetén megmarad, vagy  $-1$ -szeresre változik.  $\Lambda \neq 0$ -ra, mint megállapítottuk, minden term kétszeresen elfajult, a pályamomentum molekulatengelyhez képesti két lehetséges irányának megfelelően. Inverzió esetén a pályamomentum önmagában nem vált jelet, de a  $\zeta$  tengely irányítása is ellentétesre változik (a magkoordináták is felcserélődnek), ezért  $L_\zeta$  iránya a molekulához képest ellentétesre változik. Így az adott termhez tartozó két hullámfüggvény inverziónál egymásba megy át, ezért mindig lehetséges egy inverzióra invariáns és egy inverziónál jelet váltó kombinációt



képezni. Azaz minden egyes  $\Lambda \neq 0$  elektrontermhez két állapot, egy pozitív és egy negatív tartozik. A  $\sum (\Lambda=0)$  termék esetén az előjel külön meggondolást igényel, végeredménye a következő: ha a molekula teljes pályamomentuma  $K$ , akkor a  $\sum^+$  termék előjele  $(-1)^K$ , a  $\sum^-$  terméké pedig  $(-1)^{K+1}$ . Így az elektronhullámfüggvény  $\varphi_n(\xi_a, \eta_a, \zeta_a; r)$ , ahol  $n$  a  $2S+1A_{(g,u)}^\pm$ -n kívül tartalmazza még az adott állapotot jellemző főkvantumszámot;  $a=1 \dots, m$ ,  $m$  az elektronok száma (általában a vegyértékelektronoké). Egyéb spektroszkópai jelölések [7] és [13]-ban találhatók. Az elektronhullámfüggvény rövid jelöléssel  $|n\rangle$ , konkrét számítása helyett itt csak a többi szimmetriával foglalkozunk.

Ha a molekula két azonos atomból áll, akkor a Hamiltonian invariáns a két mag felcserélésével szemben. Az adott term a magokra nézve szimmetrikus, ha a hozzátartozó hullámfüggvény nem változik, és antiszimmetrikus, ha jelet vált az ilyen átrendezésnél. Mivel a magok felcserélése egy inverziónak és egy elektrontükörözésnek felel meg, ez a szimmetria már nem független az előzőektől, és a hozzátartozó előjel is kifejezhető az inverzió előjelének és elektronok paritásának szorzataként. Mivel a maghullámfüggvény egy koordináta és egy spinfüggő rész szorzatára bontható, a szimmetriatulajdonság kifejezhető a két mag  $i$  spinjének  $I$  eredőjével is, a következő módon: ha  $I$  páros, akkor az állapot szimmetrikus, ha páratlan, akkor antiszimmetrikus. A magspin figyelembevétele az állapotok újabb elfajulásához vezet, ezt gyakran az adott állapot statisztikus súlyának nevezik. A szimmetrikus és antiszimmetrikus állapotok elfajulásának multiplicitására,  $g_s$ , ill.  $g_a$ -ra főlegész  $i$



1. ábra.  $H_2$  és  $H_2^+$  potenciálgörbéi a magtávolság függvényében ( $a_0$  a Bohr-sugár). Az energiaskála 0 pontja a  $H_2$  alapállapot legalacsonyabb vibrációs-rotációs nívója ( $v=0, K=0$ ).  $H_2$  alapállapotú potenciálgörbe minimuma  $-0,27$  eV.  $H_2^+$  alapállapotú potenciálgörbe minimuma  $15,28$  eV, a vibrációs-rotációs alapállapot energiája  $15,43$  eV.  $H_2^+$  alapállapot disszociációs határa  $18,08$  eV.



esetén a következő arány áll fenn:  $\frac{g_s}{g_a} = \frac{i}{i+1}$ ; egész  $i$  esetén:  $\frac{g_s}{g_a} = \frac{i+1}{i}$ . Ezért pl.  $i=0$ ,  $\sum_g^-$ ;  $\sum_u^+$  állapotban a molekulának csak olyan forgásállapotai lehetségesek, amelyekre  $K$  páros;  $\sum_u^+$ ,  $\sum_g^-$  állapotban pedig  $K$  páratlan. Mivel az elektronok és a magspin direkt kölcsönhatása igen gyenge,  $I$  megváltozásának a valószínűsége még ütközésnél is igen csekély. Ezért azok a molekulák, amelyek csak  $I$  pároságában különböznek (és ezért vagy csak szimmetrikus, vagy csak antiszimmetrikus termjeik vannak) ugyanannak az anyagnak különböző módosulatait jelentik. Ilyen pl. az orto- és parahidrogén ( $i=\frac{1}{2}$ ,  $I=1$ , ill. 0).

Végül a molekulakötések egy kvalitatív tulajdonságáról. Ha két atomot egyesítünk, a betöltött elektronhéjak gyakorlatilag nem változnak, a betöltetlen elektronhéjak elektronsűrűségeloszlása azonban két határeset között tetszőleges lehet. Egyik határesetben a vegyértékelektronok az egyik atomról teljesen átmennek a másikra, úgy, hogy a molekulát ionok alkotják, melyek töltése megegyezik a vegyértékükkel. Ez a heteropoláros vagy ionos kötés. A másik szélső esetben az atomok a molekulán belül átlagosan semlegesek, az elektronsűrűség szimmetrikus a két atomra nézve. Ez a homopoláros vagy kovalens kötés. Az első oszlop elemei a hetedik oszloppal heteropoláros kötést hoznak létre, míg az azonos atomokból álló molekulák ( $H_2$ ,  $N_2$ ,  $O_2$  stb.) homopoláros kötést.

A disszertáció további részében a homopoláros kétatomos molekulák elméletével foglalkozunk, konkrét modellként a  $H_2^+$  molekulát választva. Ennek termrendszere az első ábrán látható, a  $H_2$  néhány termjével együtt.

### 3. §. A molekularezgések kvalitatív értelmezése

Amint azt az 1. és 2. §-ban kimutattuk, adiabatikus közelítésben a magmozgást az  $\epsilon_n(r)$  elektronenergia által leírt potenciáltér határozza meg. Ez az elektronenergia az elektronok mozgásállapotától függ, így természetesen az elektronok pályamenti mozgásából származó pályamomentumtól is. A forgási energiának ezt a részét (amely tehát nem a molekulának, mint egésznek a rotációjából származik) mindig az  $\epsilon_n(r)$  függvénybe értjük bele. A tényleges rotációt és az ebből származó rotációs energiát külön tárgyaljuk a 4. §-ban, ahol a fenti kijelentésnek pontos kvantitatív értelmet adunk. A magmozgást tehát az ily módon értelmezett  $\epsilon_n(r)$  potenciáltérben vizsgáljuk (amely különböző elektronállapotokban különböző lesz). A Schrödinger-egyenletet evvel a potenciállal megoldva energia nívósorozatot kapunk. Ezeket a nívókat növekedésük sorrendjében növekvő  $v=0, 1, 2 \dots$  indexszel jelöljük. A magmozgás tehát az elektrontermek  $v$  szerinti felhasadásához vezet (a forgás figyelembevétele további felhasadást okoz). Ezeknek a nívóknak a száma az egyes elektronállapotokban lehet véges vagy végtelen. Ha az elektronállapot olyan, hogy  $r \rightarrow \infty$ -re a molekula két semleges atomra esik szét, akkor az  $\epsilon_n(r)$  potenciális energia  $\frac{1}{r^2}$ -nél gyorsabban tart  $\epsilon_n(\infty)$ -hez (ami a két izolált atom energiájának összege). A diszkrét nívók száma az ilyen térben véges [18], habár molekulák esetén igen nagy. Ha  $r \rightarrow \infty$ -re a molekula két ionra esik szét, akkor nagy távolságra az  $\epsilon_n(r) - \epsilon_n(\infty) \sim \frac{1}{r}$  és ekkor végtelen számú diszkrét nívót kapunk, amelyek torlódási pontja  $\epsilon_n(\infty)$ . A normál-



állapotú molekulák többsége az első esethez tartozik. A vibrációs nívók függése a  $v$  vibrációs kvantumszámtól általánosságban nem adható meg. Az 5. §-ban ismertetünk egy analitikusan megoldható modellt a homopoláros kétatomos molekulák vibrációjára. Itt az alacsony vibrációs (és rotációs 1.4. §) kvantumszámú állapotokra érvényes harmonikus oszcillátor modellel foglalkozunk. Az  $\varepsilon_n(r)$  potenciális energiának az 1. §-ban megadott saját egyensúlyi helyzete körüli sorfejtését felhasználva

$$\varepsilon_n(r) = \varepsilon_n(r_n^0) + \frac{M\omega_n^2}{2} \xi^2, \quad (3.1)$$

ahol  $r_n^0$  az az  $r$  érték, amelyre  $\varepsilon_n(r)$  minimális ( $\varepsilon'_n(r_n^0)=0$ ),  $\xi = r - r_n^0$ . Ebben a közelítésben a vibrációs nívók ekvidisztánsnak adódnak:

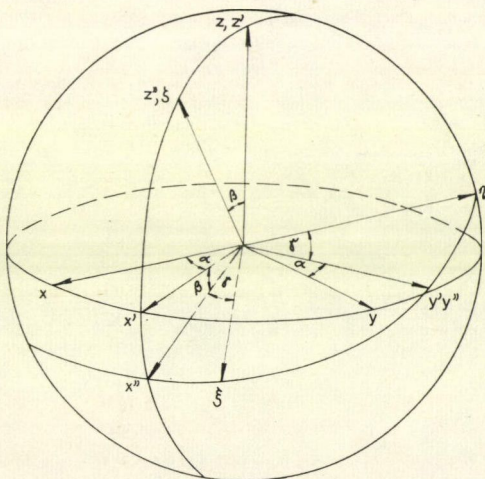
$$E_{v_n}^n = \varepsilon_n(r_n^0) + \hbar\omega_n \left( v + \frac{1}{2} \right). \quad (3.2)$$

Nagyságrendi becslést az 1. § végén található megfontolásokból kapunk. Ennek alapján könnyű molekulákra (pl.  $H_2$ ) a vibrációs nívók közötti energiakülönbség  $\sim 0,2-0,5$  eV, az egyensúlyi magtávolság ugyanis alapállapotban  $r_0 \approx 2a_0$ , ahol  $a_0$  a Bohr-sugár.

#### 4. §. A rotációs spektrum

##### A. Szinglett állapotok

Ebben a részben olyan állapotok leírásával foglalkozunk, ahol az elektronok eredő spinje 0. Ekkor kétatomos molekulák rotációjának analitikus leírásához a



2. ábra. A  $\xi\eta\zeta$  saját koordináta-rendszer  $xyz$  koordináta-rendszerhez viszonyított Euler-szögeinek értelmezése:

1.  $\alpha$  ( $0 \leq \alpha \leq 2\pi$ ) szögű forgatás a  $z$  tengely körül ( $xyz \rightarrow x'y'z'$ )
2.  $\beta$  ( $0 \leq \beta \leq \pi$ ) szögű forgatás a vesszős rendszer  $y'$  tengelye körül ( $x'y'z' \rightarrow x''y''z''$ )
3.  $\gamma$  ( $0 \leq \gamma \leq 2\pi$ ) szögű forgatás a két vesszővel jelzett rendszer  $z''$  tengelye körül ( $x''y''z'' \rightarrow \xi\eta\zeta$ ).



következő megfontolásból indulhatunk ki: a teljes molekulamozgást magába foglaló (1.1) Hamiltonian felcserélhető a molekula teljes impulzusmomentumának négyzetével és annak egy rögzített tengelyre vett vetületével. Legyen ez az  $x, y, z$  laboratóriumi rendszer  $z$  tengelye. Általánosságban a magok, ill. az elektronok impulzusmomentuma külön-külön nem cserélhető fel (1.1)-gyel, mert a magok tere nem centrál-szimmetrikus. Fennáll azonban az elektronmozgásra még egy szimmetriatulajdonság, mégpedig a következő: kétatomos molekulánál a tér axiális szimmetriát mutat, a két mag által meghatározott tengelyre nézve. Vezessünk be ezért a laboratóriumi rendszer mellett egy a molekulához rögzített  $\xi\eta\zeta$  koordináta-rendszert oly módon, hogy a  $\zeta$  tengely a molekulatengellyel essen egybe, az  $\eta$  tengely az  $xy$  síkban fekszik, a két rendszer origója pedig egybeesik. Az Euler-szögeknek a 2. ábrán látható meghatározásával egybevetve  $\alpha$  és  $\beta$  megegyezik a molekulatengely  $\varphi, \theta$  polárszögeivel a laboratóriumi rendszerhez képest,  $\gamma$  értéke pedig 0. Az elektronok a  $\zeta$  tengelyre szimmetrikus térben mozognak, és ezért az elektronok impulzusmomentumának a  $\zeta$  tengelyre eső vetülete  $L_\zeta$  megmaradó mennyiség. Foglalkozunk a továbbiakban az (1.1) Hamilton-operátorban a kinetikus energia-tag forgásból származó részének meghatározásával. B—O közelítésben (1. §) a magmozgás egyetlen  $M$  redukált tömegű részecskének az  $\varepsilon_n(r)$  által meghatározott potenciáltérben végzett mozgására vezethető vissza. A mozgáshoz tartozó impulzusmomentum  $\mathbf{K}-\mathbf{L}$ , ahol  $\mathbf{K}$  a molekula teljes momentuma,  $\mathbf{L}$  pedig az elektronmozgáshoz tartozó impulzusmomentum. A hozzátartozó kinetikus energia  $E_{\text{rot}}^{\text{mag}} = B(r) \cdot (\mathbf{K}-\mathbf{L})^2$ , ahol  $B(r) = \frac{\hbar^2}{2Mr^2}$ , az  $M$  tömegű részecske tehetetlenségi nyomatéka. Az elektronok tengely körüli mozgásából származó energia  $E_{\text{rot}}^{\text{el}} = CL_\zeta^2 = CK_\zeta^2$ , ahol  $C = \frac{\hbar^2}{2m(\xi^2 + \eta^2)}$ , az elektronok tehetetlenségi nyomatéka. Áttérve a molekulához rögzített  $\xi\eta\zeta$  koordináta-rendszerre, a molekulatengelyre vonatkozóan a teljes momentum az elektronok momentuma, míg a  $\xi$  és  $\eta$  tengelyre vonatkoztatott tehetetlenségi nyomatékok egyenlők és tekinthetők úgy, hogy csak a magmozgásból származnak. Így a teljes rotációs energia  $E_{\text{rot}} = E_{\text{rot}}^{\text{el}} + E_{\text{rot}}^{\text{mag}}$  kifejezése a molekulához rögzített rendszerben:

$$E_{\text{rot}} = BK_\xi^2 + BK_\eta^2 + CK_\zeta^2. \quad (4.1)$$

A (4.1) energiakifejezés átalakítható  $BK_\zeta^2$  hozzáadásával és levonásával és a  $\mathbf{K}^2 = K_\xi^2 + K_\eta^2 + K_\zeta^2$  jelölés bevezetésével a következő módon:

$$E_{\text{rot}} = B\mathbf{K}^2 + (C-B)K_\zeta^2. \quad (4.1a)$$

Innen azonnal leolvashatók a rotációs energia saját értékei, mivel a  $\mathbf{K}^2$  sajátértékei  $K(K+1)$ , a  $\zeta$  tengelyre vett vetület  $K_\zeta$  pedig az elektronok impulzusmomentumának molekulatengely irányú vetülete, a hozzátartozó kvantumszámot a 2. §-ban  $A$ -val jelöltük. Így:

$$E_{\text{rot}}^{K,A} = BK(K+1) + (C-B)A^2. \quad (4.2)$$

Ebben az energiakifejezésben a második tag függ az elektronok mozgásállapótól ( $A$ -n és  $C$ -n keresztül), ezért az elektronmozgást leíró (1.2) Schrödinger-egyenlethez tartozik. Így a magok rotációjából származó járuléka  $E_{\text{rot}} = BK(K+1)$ , ahol  $B = \hbar^2/2Mr^2$ . Ezt a kifejezést a magmozgást leíró Schrödinger-egyenlet radiális



része tartalmazza. Általában véve a vibrációs energiák ( $E_{v_n}^n$ ) mellett elhanyagolható járulékot ad (1.1. §), néhány esetben szükséges csak a figyelembevétele, de akkor is elegendő, ha  $B_M$ -et az egyensúlyi magtávolságban felvett  $B(r_0)$  értékkel helyettesítjük. A továbbiakban a vibrációs nívók  $\mathbf{K}$  szerinti felhasadását elhanyagoljuk.

Térjünk most át a szinglett állapotú kétatomos molekula impulzusmomentum sajátfüggvényének meghatározására. Mivel a két mag mozgása tömegközépponti rendszerben visszavezethető egyrészecske feladatra, válasszuk a laboratóriumi és a molekulához rögzített koordinátarendszer közös kezdőpontjának a két mag tömegközéppontját. Ekkor az impulzusmomentum sajátfüggvény meg fog egyezni a molekula hullámfüggvény szögfüggő részével, éppen ennek meghatározása a feladatunk. Még mielőtt a levezetés részleteibe mennénk, megjegyezzük, hogy a (4.1) Hamilton-operátor megegyezik a merev testek rotációjának elméletéből ismert szimmetrikus pörgettyű tárgyalásánál felírt  $H$  operátorral [19], [20] és sajátfüggvényei a Wigner által bevezetett forgásmátrixok [21]. A következőkben azt igazoljuk, hogy ha nem merev test, hanem kétatomos molekula rotációjáról van szó, a hullámfüggvény akkor is megegyezik a Wigner-mátrixokkal.

A molekula teljes impulzusmomentumának operátora a következő alakban írható fel:

$$\hat{\mathbf{K}} = [\mathbf{r} \times \hat{\mathbf{p}}] + \sum_a [\mathbf{r}_a \times \hat{\mathbf{p}}_a], \quad (4.3)$$

ahol  $\hat{\mathbf{p}}$  a magok relatív mozgásához tartozó impulzus,  $\mathbf{r}$  a két magot összekötő rádiuszvektor,  $\mathbf{r}_a$  és  $\hat{\mathbf{p}}_a$  az elektronok helyzetvektora és impulzusa a laboratóriumi rendszerben. Bevezetve az  $xyz$  (laboratóriumi) koordinátarendszerben a molekula-tengely polár- és azimutszögét ( $\theta$  és  $\varphi$ -t, amik egyben a molekulához rögzített rendszer Euler-szögei is),  $\mathbf{K}$  komponensei a következőképpen fejezhetők ki:

$$\hat{K}_{\pm} = e^{\pm i\varphi} \left( \pm \frac{\partial'}{\partial\theta} + i \operatorname{ctg}\theta \frac{\partial'}{\partial\varphi} \right) + \hat{L}_{\pm}; \quad \hat{K}_z = -i \frac{\partial'}{\partial\varphi} + \hat{L}_z, \quad (4.4)$$

ahol pl.  $L_x = -i \sum_a \left( y_a \frac{\partial}{\partial z_a} - z_a \frac{\partial}{\partial y_a} \right)$  az elektronok impulzusmomentumának operátora, a vonás  $\frac{\partial'}{\partial\theta}$  és  $\frac{\partial'}{\partial\varphi}$ -ben azt jelenti, hogy a deriválások rögzített  $x_a$ ,  $y_a$  és  $z_a$ -k mellett végzendők. Célszerűbb áttérni az elektronok mozgásának leírásához a  $\xi\eta\zeta$  rendszerbe, és  $\mathbf{L}$   $xyz$  komponenseit kifejezni a  $\xi\eta\zeta$  komponensekkel és a  $\varphi$ ,  $\theta$  Euler-szögekkel. Ahhoz, hogy teljesen áttérjünk a 2. §-ban bevezetett  $\xi\eta\zeta$ ;  $r\theta\varphi$  változókra, ki kell fejezni a konstans  $x_a y_a z_a$  mellett vett  $\frac{\partial'}{\partial\theta}$  ill.  $\frac{\partial'}{\partial\varphi}$  deriváltakat a konstans  $\xi_a, \eta_a, \zeta_a$  melletti  $\frac{\partial}{\partial\theta}$  és  $\frac{\partial}{\partial\varphi}$ -vel. Mindezen transzformációkat elvégezve, a 2. §-ban bevezetett változókkal kifejezve az impulzusmomentum laborrendszerbeli komponenseire a következő kifejezéseket kapjuk:

$$\begin{aligned} \hat{K}_{\pm} &= e^{\pm i\varphi} \left( \pm \frac{\partial}{\partial\theta} + i \operatorname{ctg}\theta \frac{\partial}{\partial\varphi} \right) + \frac{e^{\pm i\varphi}}{\sin\theta} \hat{L}_{\pm}; \\ \hat{K}_z &= -i \frac{\partial}{\partial\varphi}; \quad \hat{L}_{\zeta} = -i \sum_a \left( \zeta_a \frac{\partial}{\partial\eta_a} - \eta_a \frac{\partial}{\partial\xi_a} \right). \end{aligned} \quad (4.5)$$



Legyen most  $\Psi_{nAv_nKM_K} = \varphi_{nA}(\xi_a \eta_a \zeta_a; r) \varrho_{v_n, K}(r) R_{MA}^K(\theta, \varphi)$  az (1.7) alatt bevezetett molekuláris hullámfüggvény B—O közelítésben, amelyre az impulzusmomentum abszolútértéke  $K$ ,  $z$  komponense  $M$ , és az elektronok impulzusmomentumának  $\zeta$  komponense  $\hat{L}_\zeta = A$  (1.2. §).  $R_{MA}^K(\theta, \varphi)$ -nak a  $\varphi$ -tól való függése triviális:  $R_{MA}^K(\theta, \varphi) = \theta_{MA}^K(\theta) \Phi_M(\varphi)$  alakú, ahol  $\Phi_M(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{iM\varphi}$ . Amikor  $\Psi_{nAv_nKM_K}$ -re  $K_z$ , ill.  $A_\zeta$  hat, akkor ezeket az operátorokat  $M$ -mel, ill.  $A$ -val lehet helyettesíteni, amikor  $\hat{K}_+$ -t alkalmazzuk  $\Psi_{nAv_nKM_K}$ -ra ( $M=K$ ), akkor  $\theta_{KA}^K$ -ra a következő differenciálegyenletet kapjuk:

$$\left( \frac{\partial}{\partial \theta} - K \operatorname{ctg} \theta + \frac{A}{\sin \theta} \right) \theta_{KA}^K = 0, \quad (4.6)$$

ill. ebből egy általános  $\theta_{MA}^K$ -ra:

$$\theta_{MA}^K(\theta) = \sqrt{\frac{(K+M)!}{(2K)!(K-M)!}} (\hat{K}_-)^{K-M} \theta_{KA}^K(\theta) \quad (4.7)$$

(4.6), ill. (4.7) megoldásai a  $d_{MA}^K(\theta)$  mátrixok [22], a következő alakúak:  $\cos \theta = x$ ;

$$\begin{aligned} \theta_{MA}^K = d_{MA}^K = (-1)^{K-A} & \left[ \frac{(K+A)!}{2^{2K} (K-A)! (K+M)! (K-M)!} \right]^{1/2} \times \\ & \times (1+x)^{-\frac{A+M}{2}} (1-x)^{-\frac{A-M}{2}} \frac{d^{K-A}}{dx^{K-A}} [(1+x)^{K+M} (1-x)^{K-M}]. \end{aligned} \quad (4.8)$$

Megjegyezzük, hogy  $A=0$  esetén  $R_{M0}^K(\theta, \varphi) = Y_{KM}(\theta, \varphi)$  gömbfüggvénnyel egyezik meg.  $R_{MA}^K(\varphi, \theta)$  a  $D_{MA}^K(\varphi, \theta, \Psi)$  forgásmátrixszal (F.2) a következő kapcsolatban van:

$$R_{MA}^K(\varphi, \theta) = D_{MA}^K(\varphi, \theta, 0) \cdot \sqrt{\frac{2K+1}{4\pi}}, \quad (4.9)$$

ahol a normálási faktort a  $\int R_{MA}^{K*} R_{MA}^K d\Omega = 1$  feltételből határoztuk meg. A harmadik Euler-szög éppen a szimmetriatulajdonságok miatt választható nullának, ugyanis a molekulához rögzített  $\xi\eta\zeta$  koordinátarendszer  $\xi\eta$  tengelyei a molekulatengelyre merőleges síkban tetszőlegesen vehetők fel és azt a járulékos feltételt tettük, hogy az  $\eta$  tengely legyen az  $xy$  síkban.

#### B. Multipliett termek

Ha az elektronok eredő  $S$  spinje 0-tól különbözik, akkor 0-dik közelítésben, azaz a relativisztikus effektusok teljes elhanyagolásánál, a spin és a molekula forgásából származó impulzusmomentum külön-külön megmaradó mennyiségek és a teljes hullámfüggvény egy spin- és egy koordinátafüggő tényező szorzatára bontható. Emellett az (1.1) Hamilton-operátor spinfüggetlen, ami az energiaszintek  $(2S+1)$ -szeres elfajulásához vezet. A spinfüggetlen operátorok mátrixeleme diagonális lesz a spinváltozóknak, tehát ebben a közelítésben a spinváltozóktól eltekinthetünk, mint ezt a II. Részben tesszük.

A relativisztikus effektusok közül legfontosabb az elektronspinek és a pályamomentumok kölcsönhatása, aminek következtében az energia függ a spinek tengelyirányú vetületétől (spin-tengely kölcsönhatás). Mivel Hund volt az első, aki a



kötéstípusokat ebből a szempontból osztályozta, annak megfelelően, hogy a spintengely kölcsönhatási energia sokkal nagyobb, vagy sokkal kisebb, mint a forgásból származó energijárulék (amelyet az egy  $K$  értékhez tartozó nivók közti távolság jellemez), beszélünk a Hund-féle  $a$ , ill. a Hund-féle  $b$  esetről. Természetesen a két határeset közötti közbenső típusok is lehetségesek.

Az  $a$  esetben az elektronspinek tengelyirányú vetülete  $\sum$  és az elektron pályamomentumok tengelyirányú vetülete  $\Lambda$  egyaránt megmaradó mennyiség, és a kettő összege  $\Omega = \sum + \Lambda$  is az. Felhasználva  $D$ -nek azt a tulajdonságát, hogy az  $xyz$  és a  $\xi\eta\zeta$  rendszer közti transzformációt is leírja (F.1), a spinfüggőrészre:  $\varphi_{\Sigma\Lambda}^S = \sum_{\sigma=-S}^S D_{\sigma\Sigma}^{S*}(\varphi, \theta, 0) \varphi_{\sigma\Lambda}^S$  és a teljes hullámfüggvény:

$$\Psi_{M\Lambda}^{JS} = \sqrt{\frac{2J+1}{4\pi}} D_{M\Omega}^J(\varphi, \theta, 0) \sum_{\sigma=-S}^S D_{\sigma\Sigma}^{S*}(\varphi, \theta, 0) \varphi_{\sigma\Lambda}^S. \quad (4.10)$$

A (4.9)-cel történő összehasonlítás azonnal megmutatja, hogy  $K$  szerepét most a  $J$  teljes impulzusmomentum veszi át,  $\Lambda$ -ét  $\Omega$ , a hullámfüggvény pedig szorzatalakú, és a nulladik közelítés hullámfüggvényétől csak annyiban különbözik, hogy  $\sigma$  ezúttal nem megmaradó mennyiség és a pályamomentumtól függő tényező helyett az első tényezőben a teljes momentum szerepel.

A  $b$  esetben két momentumot,  $K$ -t és  $S$ -et kell összegeznünk oly módon, hogy az eredő  $\mathbf{J}^2 = (\mathbf{K} + \mathbf{S})^2$  és ennek  $J_z = M$  vetülete mellett  $\mathbf{K}^2$  és  $\mathbf{S}^2$ , valamint  $L_\zeta$  legyenek megmaradó mennyiségek. A két momentum összeadásánál kapott eredménynek megfelelően, (F.11) és (F.12) alapján a hullámfüggvény:

$$\begin{aligned} \Psi_{M\Lambda}^{JKS} = & \sqrt{\frac{(2K+1)(2J+1)}{4\pi}} \sum_{m,\sigma} (-1)^{K-S+M} \times \\ & \times \begin{pmatrix} KS \\ m\sigma - M \end{pmatrix} D_{m,\Lambda}^K(\varphi, \theta, 0) (\varphi_{\sigma\Lambda}^S). \end{aligned} \quad (4.11)$$

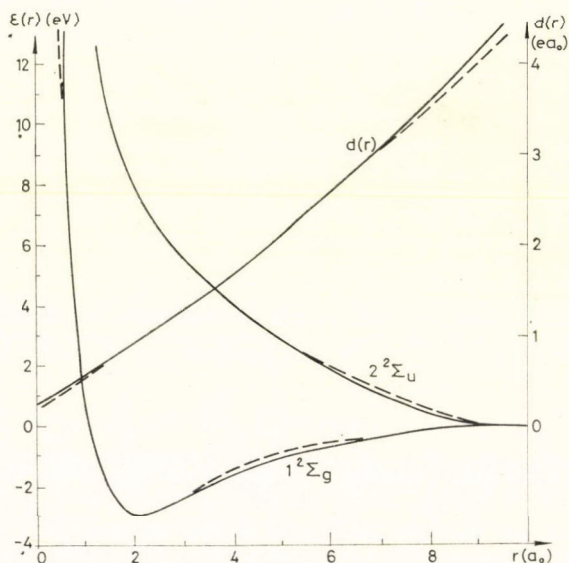
A (4.9), (4.10) és (4.11) kifejezések jelentősége abban áll, hogy segítségükkel az általában spinfüggetlen elektronoperátoroknak a kétatomos molekula különböző állapotai közötti átmeneti mátrixelemeire kapott kifejezések függése a spin- és pályamomentum kvantumszámoktól adott kötéstípuson belül teljesen egységes módon határozható meg.

### 5. §. A kétatomos molekulák vibrációinak leírása modellpotenciállal

Mint azt az 1. és 2. §-ban megállapítottuk, a magmozgás olyan potenciáltérben történik, amelynek potenciális energiája az  $n$  elektronállapot  $\varepsilon_n(r)$  elektronenergiája, ahol  $\varepsilon_n(r)$  az  $r$  magtávolság függvénye. Valóságos molekulában a vonzóerő 0-hoz tart, ha a két atom igen nagy távolságban van egymástól és ennek megfelelően az elektronenergia is véges állandó értékhez tart. Ha a két atomot minden határon túl közelítjük egymáshoz, akkor a két mag közeledése miatt az atomok között taszítóerő lép fel, amely a magtávolság csökkenésével végtelenhez tart, ennek megfelelően az elektronenergia csökkenő magtávolsággal szintén végtelenhez tart. Ezen két szélső helyzet közben az energiagörbe lehet monoton csökkenő, illetőleg lehet minimuma.



Az első esetben a molekularezgések amplitúdója végtelen, azaz egyensúlyi állapot csak végtelen magtávolságnál lehet (disszociáció). A második esetben az egyensúlyi helyzet körül viszonylag kisamplitúdójú rezgések lehetségesek, aminek során a molekula visszatér az egyensúlyi állapotba. Az egyensúlyi helyzet körüli potenciálgörbe közelíthető parabolával (1. 1. és 3. §) és ekkor a rezgések a harmonikus oszcillátor rezgései szerint írhatók le. Elsősorban a magasabban fekvő vibrációs nívók, a folytonos spektrum és a disszociáló elektronállapotok azonban nem írhatók le ebben a közelítésben. Általában minden olyan problémánál, ahol a vibrációs nívók szerepet játszanak (vibrációs átmenetek, összegzés a vibrációs nívók teljes rendszerére), a potenciális energia alakja jelentős szerepet játszik. Általában az igazi potenciálgörbét empirikusan határozzák meg [23] és ezt vetik össze a B—O energiagörbével. Ez a módszer azonban igen nehézkes ahhoz, hogy további számítások alapját képezze. Éppen ezért az irodalomban már több kísérlet történt arra, hogy az „igazi” potenciálgörbét valamilyen modellpotenciállal helyettesítsék [24], ez azonban addig nem vezetett eredményre, amíg a modell paraméterei a rendelkezésre álló adatok bizonytalansága miatt nem voltak egyértelműen meghatározhatók. A következőkben egy olyan potenciális energiamodellt ismertetünk, amely homopoláros kétatomos molekulák elektronenergiatermjeit kielégítően közelíti és a modell paraméterei is meghatározhatók a számított potenciálgörbékéből. Homopoláros molekulák esetén, mint azt [25]-ben kimutatták, a valódi potenciálgörbe igen jól approximálható a Morse-



3. ábra.  $H_2^+$  alap ( $1^2 \Sigma_g$ ) — és első gerjesztett ( $2^2 \Sigma_u$ ) — elektronállapotának potenciálgörbéi és az  $1^2 \Sigma_g \rightarrow 2^2 \Sigma_u$  átmeneti dipólmomentum. Szaggatottal az (5.2) és (9.1) közelítő kifejezéseket ábrázoltuk. Az ott szereplő paraméterek:  $r_0 = 2a_0$ ,  $\alpha = 0,72a_0^{-1}$ ,  $D_0 = D_1 = 2,79$  eV,  $t_0 = 1$ ,  $t_1 = -1,11$ ,  $Q_1 = 0$ ; valamint  $d(r_0) = 1,05$  ea<sub>0</sub>,  $d'(r_0) = 0,396e$ ,  $x = -0,055$ .



potenciállal. A valódi elektronenergia-görbét tehát a következő alakú potenciál-függvénnyel közelítjük:

$$V_0(r) = D_0[e^{-2\alpha(r-r_0)} - 2e^{-\alpha(r-r_0)}]. \quad (5.1)$$

A gerjesztett elektronállapotok potenciálgörbéit a

$$V_i(r) = D_i[e^{-2\alpha(r-r_0)} - 2t_i e^{-\alpha(r-r_0)}] + Q_i \quad (5.2)$$

kifejezésekkel közelítjük. Ez mind a vonzó ( $t_i > 0$ ), mind a taszító ( $t_i < 0$ ) elektron-állapotokra jó közelítést jelent. A numerikus fittelést a  $H_2^+$  molekula elektronállapotaira végeztük el. Az alap és első gerjesztett elektronállapotok tényleges potenciálgörbéi és az (5.1) és (5.2) által adott közelítések a 3. ábrán vannak feltüntetve. (5.1)-ben  $D_0$  a potenciálgörbe minimumához tartozó energiaérték,  $r_0$  az egyensúlyi magtávolság és  $\alpha$  az ún. anharmonicitási konstans, amely a potenciálgörbe  $\Delta$  fél-szélességével a következő kapcsolatban áll:  $\alpha = 1,76\Delta^{-1}$ . (5.2)  $t_i > 0$  esetén a következő alakra hozható:

$$V_i(r) = t_i^2 D_i[e^{-2\alpha(r-r_i)} - 2e^{-\alpha(r-r_i)}] + Q_i;$$

ahol  $r_i = r_0 - \alpha^{-1} \ln t_i$ . B—O közelítésben a vibrációt a magok hullámfüggvényének radiális részére vonatkozó radiális Schrödinger-egyenlet írja le (vö. 1. és 4. §), tehát

$$\frac{d^2\chi}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d\chi}{dr} + \frac{2M}{\hbar^2} \left[ E - \frac{\hbar^2}{2M} \frac{K(K+1)}{r^2} - \varepsilon_n(r) \right] \chi = 0, \quad (5.3)$$

ahol  $\varepsilon_n$  helyébe (5.1)-et, ill. (5.2)-t helyettesítjük. Mivel  $\varepsilon_n(r)$   $K$ -tól való függése igen gyenge, a továbbiakban  $K=0$ -t teszünk fel. Először végezzük el az  $y = 2\beta e^{-\alpha(r-r_0)}$  helyettesítést. Utána helyettesítsünk  $\chi$  helyébe  $W = y^{1/2} r \chi$ -t, és az  $r$  szerinti deriválást írjuk át  $y$  szerinti deriválásra, ekkor végül a következő egyenletet kapjuk:

$$W'' + \left[ \frac{1/4 - \zeta^2}{y^2} + \frac{t\beta}{y} - \frac{1}{4} \right] W = 0, \quad (5.4)$$

ahol  $\zeta = \frac{\sqrt{2m(Q_i - E)}}{\alpha\hbar}$  és  $\beta = \frac{\sqrt{2mD_i}}{\alpha\hbar}$ , és vesszővel az  $y$  változó szerinti deriválást jelöltük. Az (5.4) egyenlet a konfluens hipergeometrikus függvények differenciálegyenletének speciális esete, az ún. standard Whittaker-egyenlet, amelynek két lineárisan független megoldása van [26]. Az  $M_{1/2-t\beta+\zeta, 1+2\zeta}$  Whittaker-függvény (amelyet  $M_{t\beta, \zeta}$ -vel jelölünk) reguláris  $y \rightarrow 0$  esetén és a  $W_{t\beta, \zeta}(y)$  Whittaker-függvény, (5.4) másik fundamentális megoldása reguláris  $y \rightarrow \infty$  esetén. A fenti Whittaker függvények meghatározása a következő:

$$M_{t\beta, \zeta}(y) = e^{-1/2y} y^{\zeta+1/2} \Phi(1/2 - t\beta + \zeta, 2\zeta + 1; y), \quad (5.5)$$

ahol  $\Phi$  a konfluens hipergeometrikus függvény [27], és

$$W_{t\beta, \zeta}(y) = \frac{\Gamma(-2\zeta)}{\Gamma(1/2 - \zeta - t\beta)} M_{t\beta, \zeta}(y) + \frac{\Gamma(2\zeta)}{\Gamma(1/2 + \zeta - t\beta)} M_{t\beta, -\zeta}(y). \quad (5.6)$$

A konfluens hipergeometrikus függvények Taylor-sorában a sorfejtési együtthatók tulajdonságaiból kapjuk, hogy  $M_{t\beta, \zeta}(y)$  a kötött állapot sajátfüggvénye



vonzó potenciál esetén. A regularitás feltételéből:  $\frac{1}{2} - t\beta + \zeta = -v$ , azaz a vibrációs nívók energiasajátértékei:

$$E_v = Q - Dt^2 \left[ 1 - \frac{v+1/2}{t\beta} \right]^2 \quad v = 0, 1, \dots \quad (5.7)$$

Ebben az esetben a konfluens hipergeometrikus függvények egyszerű polinomokra redukálódnak:  $r\chi = y^{-1/2} M_{t\beta, t\beta-v-1/2}(y)$  és kielégítik a határfeltételeket. A normálási együttható szintén meghatározható és így a diszkrét spektrum normált hullámfüggvénye

$$r\chi_v(r) = \frac{[\alpha(2t\beta - 2v - 1)\Gamma(2t\beta - v)]^{1/2}}{(v!)^{1/2}\Gamma(2t\beta - 2v)y^{1/2}} M_{t\beta, t\beta-v-1/2}(y). \quad (5.8)$$

A folytonos spektrumhoz tartozó hullámfüggvények ( $E - Q > 0$ ), akár vonzó ( $t > 0$ ) akár tasztító ( $t < 0$ ) potenciál esetén a  $W_{t\beta, iq/\alpha}(y)$  Whittaker-függvényekkel adhatók meg, ahol  $q = \frac{1}{h} (2m(E - Q))^{1/2}$ , a disszociáló részek relatív mozgásának hullámszáma. Ez a megoldás  $y \rightarrow \infty$ -re reguláris.  $\chi_q(r)$ -re megadható aszimptotikus alak nagy  $r$  esetén ( $y \rightarrow 0$ ) (5.6) segítségével:

$$\begin{aligned} \chi_q(r) &= \frac{1}{r\sqrt{2\pi y}} \left| \frac{\Gamma(1/2 - t\beta + iq/\alpha)}{\Gamma(2iq/\alpha)} \right| W_{t\beta, iq/\alpha}(y) = \\ &= \frac{1}{r\sqrt{2\pi y}} [e^{-ix} M_{t\beta, iq/\alpha}(y) + c. c.] \end{aligned} \quad (5.9)$$

ebből

$$\begin{aligned} \chi_q(r \rightarrow \infty) &= \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{\sin(qr + \eta_0)}{r}; \\ \eta_0 &= x + \frac{1}{2} \pi - qr_0 - q/\alpha \ln 2\beta; \quad x = \arg \left[ \frac{\Gamma(2iq/\alpha)}{\Gamma(1/2 - t\beta + iq/\alpha)} \right]. \end{aligned} \quad (5.10)$$

Az (5.2) potenciállal felírt (5.3) Schrödinger-egyenlet Green-függvénye (radiális Green-függvény), a következő egyenletet elégíti ki:

$$\begin{aligned} \left\{ \frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} + \frac{2M}{\hbar^2} \left[ E - \frac{\hbar^2}{2M} \frac{K(K+1)}{r^2} - \varepsilon_n(r) \right] \right\} g(r, r'; E) = \\ = - \frac{2M}{\hbar^2} \frac{\delta(r - r')}{rr'}. \end{aligned} \quad (5.11)$$

Mivel (5.11) megoldása formálisan a

$$g(r, r'; E) = \sum_v \frac{\chi_v(r)\chi_v(r')}{E - E_v} + \int dE' \frac{\chi_{E'}(r)\chi_{E'}(r')}{E - E'} \quad (5.12)$$

alakra hozható, ebből a felírásból kitűnik, milyen fontos szerepet játszik a Green-függvény a perturbációs számításban, tehát (5.11) megoldásának ismerete a pertur-



bációs sor felösszegzését egyetlen integrál kiszámítására vezeti vissza. Az (5.3) Schrödinger-egyenlet két reguláris megoldásának ismeretében (5.11) megoldása a következő alakban írható fel [28]:

$$g(r, r'; E) = -\frac{2M}{\hbar^2} \frac{\theta(r'-r)\chi_a(r)\chi_b(r') + \theta(r-r')\chi_a(r')\chi_b(r)}{r^2 \Delta}, \quad (5.13)$$

ahol  $\chi_a$ , ill.  $\chi_b$  regulárisak a potenciál  $a$ , ill.  $b$  szinguláris pontjaiban ( $a < r < b$ );  $\Delta$  a  $\chi_a$  és  $\chi_b$  függvények Wronski-determinánsa:  $\Delta = \chi_b \frac{d\chi_a}{dr} - \chi_a \frac{d\chi_b}{dr}$  [29]; és  $\theta(x)$  az egységugrás-függvény. A két reguláris megoldásnak (5.5)-öt és (5.6)-ot választva (5.13) kiszámítható és a következő kifejezés adódik:

$$g(r, r'; E) = -\frac{2M}{\alpha \hbar^2 r r'} (y \cdot y')^{-1/2} \frac{\Gamma(\zeta - t\beta + 1/2)}{\Gamma(2\zeta + 1)} \times \\ \times [\theta(y' - y) M_{t\beta, \zeta}(y) W_{t\beta, \zeta}(y') + \theta(y - y') M_{t\beta, \zeta}(y') W_{t\beta, \zeta}(y)]. \quad (5.14)$$

Ez a kifejezés a perturbációs számításban fellépő, teljes rendszerre történő összegzés problémáját az (5.12) formális megoldás alapján visszavezeti a Green-függvényt tartalmazó  $r$  és  $r'$  szerinti analitikus integrálok számítására. A II. Részben az itt leírt modell alapján meghatározzuk  $H_2^+$  molekulán történő vibrációs Raman-szórás szórási hatáskeresztmetszetének numerikus értékét és egyéb jellemző tulajdonságait.



## II. RÉSZ

### Fényszórás kétatomos molekulákon

#### 6. §. A szórási tenzor

A fényszórás a következő elemi folyamatokból áll: a beeső  $\mathbf{k}$  impulzusú foton abszorbeálódik és egy  $\mathbf{k}'$  impulzusú fotont emittál a szórórendszer. Ha a szórt fénny impulzusának abszolútértéke  $k' = \left(\frac{\hbar\omega'}{c}\right)$  nem változik ( $\omega = \omega'$ ), akkor rugalmas, ellenkező esetben rugalmatlan szórásról beszélünk. Célszerűbb a szórásfolyamatokat a szórórendszer szempontjából vizsgálni. A szórás után a szórórendszer energiája vagy megegyezik a szórás előttivel, vagy valamilyen egyéb értéket vesz fel. Az első esetben a szórt fénny frekvenciája nem változik (Rayleigh-szórás), a második esetben a következő értékkel változik meg:

$$\hbar\omega' - \hbar\omega = E_1 - E_2, \quad (6.1)$$

ahol  $E_1$  és  $E_2$  a kezdeti, ill. végállapot energiája (Raman-szórás). Mivel az elektromágneses kölcsönhatás operátora eltűnik olyan átmenetekre, amelyekben a foton-szám kettővel változik, ezért a fényszórás a perturbációs számítás másodrendjében fellépő folyamat. A közbenső állapotok (amelyeken keresztül a szórásfolyamat lezajlik) kétféleképpen lehetnek: vagy egy  $\mathbf{k}$  impulzusú fotont abszorbeál a rendszer és átmegy egy  $E_n$  energiájú állapotba (és ekkor a következő átmenetnél emittál egy  $\mathbf{k}'$  impulzusú fotont), vagy egy  $\mathbf{k}'$  impulzusú fotont emittál és átmegy egy  $E_n$  energiájú állapotba (ekkor a következő átmenetnél abszorbeál egy  $\mathbf{k}$  impulzusú fotont). Ennek a folyamatnak a mátrixeleme:

$$V_{21} = \sum_n \left[ \frac{V'_{2n} V_{n1}}{E_1 - E_n + \hbar\omega} + \frac{V_{2n} V'_{n1}}{E_2 - E_n - \hbar\omega} \right], \quad (6.2)$$

ahol  $V$  a  $\mathbf{k}$  fotonabszorpció mátrixeleme, és  $V'$  a  $\mathbf{k}'$  fotonemisszió mátrixeleme. A továbbiakban feltesszük, hogy a beeső és a szórt fotonok hullámhossza egyaránt jóval nagyobb, mint a szórórendszer mérete. Fényszórásnál ez a feltevés atomokra és molekulákra egyaránt jól teljesül, ui. a Bohr-sugár (ami a fenti szórórendszerek esetén jellemző a lineáris méret nagyságrendjére)  $\sim 0,5 \text{ \AA}$  és a látható fénny hullámhossza  $\sim 5 \times 10^3 \text{ \AA}$ . Ezért az átmeneteket dipólközelítésben vizsgáljuk, és az elektromágneses kölcsönhatás operátora ebben a közelítésben a következő lesz:

$$V = -\mathbf{d} \cdot \mathbf{E} \quad (6.3)$$

ahol  $\mathbf{E} = -\frac{1}{c} \dot{\mathbf{A}}$ , homogén, időfüggő elektromos tér,  $\mathbf{d}$  a szórórendszer teljes dipólmomentuma. A foton hullámfüggvénye  $\mathbf{A}_e(\omega) = \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{V\omega}} \mathbf{e} e^{-i\omega t}$  ahol  $\mathbf{e}$  a polari-



zációs egységvektor. Ekkor a (6.2)-ben szereplő mátrixelemek közül pl.  $V_{n1} = -i \sqrt{\frac{2\pi\hbar\omega}{V}} \mathbf{e} \mathbf{d}_{n1}$ . A differenciális hatáskeresztmetszet kifejezése a (6.2) átmeneti mátrixelemmel:

$$d\sigma = \frac{2\pi}{\hbar} |V_{21}|^2 \frac{1}{F} \varrho(\omega') d\Omega', \quad (6.4a)$$

ahol  $\varrho(\omega')$  az egységnyi energiaintervallumba eső állapotok száma, azaz  $\varrho(\omega') = \frac{V\omega'^2}{(2\pi c)^3 \hbar}$  és  $F = \frac{c}{V}$  a bejövő fotonok fluxusa. (6.2)-be helyettesítve  $V_{n1}$ -t, majd az így adódó kifejezést, valamint  $\varrho(\omega')$ -t és  $F$ -et (6.4a)-ba helyettesítve, végül a differenciális hatáskeresztmetszetre a következő kifejezést nyerjük:

$$d\sigma = \left| \sum_n \left\{ \frac{(\mathbf{d}_{2n} \mathbf{e}^*)(\mathbf{d}_{n1} \mathbf{e})}{E_{n1} - \hbar\omega} + \frac{(\mathbf{d}_{2n} \mathbf{e})(\mathbf{d}_{n1} \mathbf{e}^*)}{E_{n2} + \hbar\omega} \right\} \right|^2 \frac{\omega\omega'^3}{c^4} d\Omega'. \quad (6.4)$$

Az összegzés a szórórendszer valamennyi lehetséges állapotára kiterjed. Vezessük be a következő jelölést:

$$c_{ik}^{(21)} = \sum_n \left\{ \frac{(d_i)_{2n}(d_k)_{n1}}{E_{n1} - \hbar\omega} + \frac{(d_k)_{2n}(d_i)_{n1}}{E_{n2} + \hbar\omega} \right\} \quad (6.5)$$

( $i, k = x, y, z$  háromdimenziós vektorkomponensek, vagy  $-1, 0, 1$  gömbi koordináták). Ezt felhasználva a (6.4) kifejezést átírhatjuk a következő alakba:

$$d\sigma = |c_{ik}^{(21)} e_i^* e_k|^2 \frac{\omega\omega'^3}{c^4} d\Omega'. \quad (6.6)$$

Mivel a kétindexes tenzor definíció szerint úgy transzformálódik, mint két vektorkomponens szorzata, és ez a tulajdonság (6.5)-ből közvetlenül is leolvasható, ezért a  $c_{ik}^{(21)}$  mátrixelemek tenzort alkotnak. Per. def.:  $c_{ik}^{(21)}$  a szórási tenzor. A fentiekből következik, hogy a szórási folyamatok kiválasztási szabályai megegyeznek a másodrangú tenzorokra érvényes kiválasztási szabályokkal, ezekkel részletesen a 7. §-ban foglalkozunk.

Vizsgáljunk most  $N$  azonos szórócentrumon történő szórásfolyamatot, amelyek olyan  $V$  térfogatba vannak zárva, amelynek lineáris mérete jóval kisebb a fény hullámhosszánál. A  $N$  centrum szórási tenzora az egyes szórócentrumok szórási tenzorainak összege lesz. Ekkor figyelembe kell vennünk, hogy a különböző szórócentrumok hullámfüggvényei már nem lesznek azonosak, hanem egy tetszőleges fázisfaktorban különbözhetnek egymástól. A szórási hatáskeresztmetszetet az egyes szórócentrumok fázisfaktoraira ki kell átlagolni. A  $c_{ik}^{(21)}$  szórási tenzor minden egyes szórócentruma tartalmaz egy  $e^{i(\varphi_1 - \varphi_2)}$  faktort, ahol  $\varphi_1$  és  $\varphi_2$  a kezdő és végállapot fázisai. Raman-szórás esetén a kezdő és végállapot különböző és így ez a faktor sem 1. A  $|e_i^* e_k \sum c_{ik}^{(21)}|^2$  kifejezésben a különböző szórócentrumhoz tartozó tagok szorzata tartalmazni fogja a két centrum fázisainak különbségét. A különböző szórócentrumok fázisait függetlennek tekintve és az átlagolást eszerint elvégezve azt tapasztaljuk, hogy a vegyes tagok kiesnek és csak a szórási hatáskeresztmetszetek adódnak össze, a teljes hatáskeresztmetszet az egy centrum hatáskeresztmetszetnek



$N$ -szerese (inkoherens szórás). Ha viszont a kezdeti és végállapot megegyezik, akkor  $e^{i(\varphi_1 - \varphi_2)} = 1$ . Ebben az esetben a szórási tenzorok egyszerűen összeadódnak, az eredményük  $N$ -szeres lesz a szórási hatáskeresztmetszet pedig az egy centrum hatáskeresztmetszetének  $N^2$ -szerese. Ha tehát a szórócentrum energiaszintjei nem elfajultak, akkor a Rayleigh-szórás egyúttal koherens is. Ha azonban az energiaszintek elfajultak, akkor koherens és inkoherens szórás egyaránt fellép. A Rayleigh-szórás klasszikus elméletében az inkoherens szórás nem lép fel, ez tehát teljesen kvantumos effektus. A koherens szórás szórási tenzora (6.5)-ből:

$$c_{ik}^{(11)} = \alpha_{ik} = \sum_n \left[ \frac{(d_i)_{1n}(d_k)_{n1}}{E_{n1} - \hbar\omega} + \frac{(d_k)_{1n}(d_i)_{n1}}{E_{n1} + \hbar\omega} \right]. \quad (6.7)$$

Összehasonlítva a perturbációszámításból megismert kifejezéssel, látjuk, hogy ez egybeesik a polarizálhatósággal, és egyben a rendszer által elnyelt energia arányossági tényezője (Stark-együttható).

A továbbiakban áttérünk a fenti általános formulák kétatomos molekulák esetére érvényes specializálására, a szórástenzor szimmetriatulajdonságainak és az ebből levonható következtetések vizsgálatára.

#### 7. §. A hatáskeresztmetszet szög- és polarizációfüggése, szimmetriatulajdonságok

A szórási tenzor szimmetriatulajdonságainak vizsgálatához célszerű áttérni az  $xyz$  derékszögű koordinátákról az (F. 4)-ben definiált gömbi koordinátákra. A (6.4)-és (6.6)-ban szereplő skalárszorzatok ekkor (F. 4a)-nak megfelelően módosulnak. A továbbiakban mindig feltesszük, hogy a  $c_{ik}^{(21)}$  tenzorkomponensek a gömbi komponenseket jelentik. Vezessük be a  $c_{ik}^{(21)}$  tenzor mellett azt a  $t_{ik}^{(21)}$  tenzort, amelynek a rotációs állapotok szerinti mátrixeleme  $c_{ik}^{(21)}$ . Ez igen egyszerűen megtehető, mivel a teljes molekula hullámfüggvény  $B-O$  közelítésben szorzatalakú és így  $c_{ik}^{(21)}$  és  $t_{ik}^{(21)}$  kapcsolatára a következő kifejezés adódik:

$$c_{ik}^{(21)} = \langle K_2 M_2 A_2 | t_{ik}^{(21)} | K_1 M_1 A_1 \rangle \quad (7.1)$$

$t_{ik}^{(21)}$ -ben az 1 és 2 indexek most a kezdeti és végállapot elektron- és vibrációs indexeit jelentik. A továbbiakban ahol nem zavaró a (21) indexeket elhagyjuk. Fejezzük ki a laboratóriumi rendszerben értelmezett  $t_{ik}$  tenzorkomponenseket a molekulához rögzített  $\xi, \eta, \zeta$  rendszerben értelmezett  $t_{i'k'}$  tenzorkomponensekkel. (F. 1)-nek megfelelően a két tenzor kapcsolata így írható:

$$t_{ik} = \sum_{i'k'} D_{ii'}^1(\varphi, \theta, 0) D_{kk'}^1(\varphi, \theta, 0) t_{i'k'}. \quad (7.2)$$

Mivel a molekulával együttforgó koordináta-rendszerben rotációs struktúra nincs, ezért a  $t_{i'k'}$  mennyiségek a rotációtól függetlenek, csak az elektron, ill. vibrációs kvantumszámokat tartalmazzák. Ezért a  $c_{ik}$  szórási tenzor kifejezhető a következő alakban:

$$c_{ik} = \sum_{i'k'} \langle K_2 M_2 A_2 | D_{ii'}^1 D_{kk'}^1 | K_1 M_1 A_1 \rangle t_{i'k'}. \quad (7.3)$$



A rotációs struktúrára a  $\langle K_2 M_2 A_2 | D_{ii'}^1, D_{kk'}^1 | K_1 M_1 A_1 \rangle$  mennyiség a jellemző és a  $c_{ik}$  szimmetriatulajdonságait is ebből fogjuk meghatározni. Ezért a továbbiakban ezen kifejezés vizsgálatával foglalkozunk, a következő egyszerűsítő feltevések mellett: a kezdő és a végállapot ugyanahhoz az elektrontermhez (elektron alapállapot) tartozik, tehát  $A_1 = A_2 = 0$ , csak a vibrációs és a rotációs kvantumszámok változhatnak. (7.3)-ban két  $D$  mátrix szorzata áll, ez két impulzusmomentum sajátvektor szorzatának transzformációját írja le. Mivel a két sajátvektor szorzata felbontható az eredő impulzusmomentum sajátvektorai szerint, ugyanez a felbontás elvégezhető a transzformációra, azaz (F. 19)-nek megfelelően két  $D^j_i$  mátrix szorzata kifejtethető az eredő  $D^j$  mátrixok szerint:

$$D_{ii'}^1(\omega) D_{kk'}^1(\omega) = \sum_{j,n,n'} (2j+1) \begin{pmatrix} 1 & 1 & j \\ i & k & n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 & j \\ i & k & n' \end{pmatrix} (-1)^{n'-n} \mathbf{D}_{-n, -n'}^j(\omega). \quad (7.4)$$

Itt  $\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j \\ m_1 & m_2 & m \end{pmatrix}$  a Wigner-féle  $3j$  szimbólum (F. 12). Ezt a kifejezést (7.3) rotációs részébe helyettesítve és a  $|KMA\rangle$  rotációs sajátfüggvény (4.9) alakját felhasználva a  $\varphi$  és  $\theta$  szerinti integrálok elvégezhetőek és (F. 20) alapján a következőt kapjuk:

$$\langle K_2 M_2 0 | D_{ii'}^1, D_{kk'}^1 | K_1 M_1 0 \rangle = \sqrt{(2K_1+1)(2K_2+1)} \sum_{jn} (2j+1) (-1)^{M_1} \times \\ \times \begin{pmatrix} 1 & 1 & j \\ i & k & n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 & j \\ i' & -i' & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} K_2 & j & K_1 \\ -M_2 & -n & M_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} K_2 & j & K_1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \delta_{i', -k'}. \quad (7.5)$$

Ezt a kifejezést (7.3)-ban felhasználva, azonnal láthatjuk, hogy a szórási tenzorhoz csak a  $t_{i' - i'}$  típusú tagok adnak járulékot. A következőkben megmutatjuk, hogy a  $t_{i' - i'}$  típusú tenzorkomponensek valósak és közülük csak kettő független. Ugyanis a molekula saját koordinátarendszerében  $d_{\perp} = d_{\xi} = d_{\eta} \neq d_{\zeta} = d_{\parallel}$  és a gömbi komponensekre  $d_{1'} = -d_{-1'}^* = -d_{\perp} e^{i\pi/4}$ ,  $d_{0'} = d_{\parallel}$ . Mivel  $\mathbf{d}$  valós vektor, a mátrixelemei is valósak, ha az állapot nem elfajult, és a fenti előállításból a következőket kapjuk:  $t_{i' - i'} = t_{-i' - i'}$ ; bevezetjük a következő jelölést:

$$t_{1', -1'} = t_{-1', 1'} = -t_{\perp}; \quad t_{0' 0'} = t_{\parallel}. \quad (7.6)$$

Térjünk most vissza a (7.5) előállításhoz. Mivel a  $3j$  szimbólumok felső indexeire érvényes háromszögegyenlőtlenség szerint  $|j_1 - j_2| \leq j \leq |j_1 + j_2|$ , az összegzésben  $j$  csak a 0, 1 és 2 értékeket veheti fel. Ez annak felel meg, hogy egy  $3 \times 3$ -as tenzor három invariáns szimmetriatulajdonságú irreducibilis részre bontható: invariáns a tenzor spurja (skaláris mennyiség,  $j=0$  szerint transzformálódik), egy antiszimmetrikus részre ( $j=1$ , axiálvektorként transzformálódik) és egy szimmetrikus másodrendű tenzorra, melynek spurja 0 ( $j=2$ ,  $2j+1=5$  független komponense van). Vizsgáljuk most külön-külön az egyes irreducibilis részek járulékait  $c_{ik}$ -hoz:

a)  $j=0$ . Ekkor (F. 16) alapján  $\begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ m & -m & 0 \end{pmatrix} = (-1)^{1-m} \frac{1}{\sqrt{3}}$  és az  $i'$ -re vonatkozó összegzés elvégzése után

$$c_{ik}^0 = (-1)^{K_1+i} \delta_{K_1 K_2} \delta_{M_1 M_2} \delta_{i, -k} \frac{1}{3} (t_{\parallel} + 2t_{\perp}) \quad (7.7a)$$



adódik. A skaláris szórási tenzor tehát független a rotációtól (izotrop szórás) és csak a  $t$  tenzor spurjától függ.

b)  $j=1$ . Ekkor (F. 17) alapján  $\begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ i' & -i' & 0 \end{pmatrix} = (-1) \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ -i' & i' & 0 \end{pmatrix}$ . Ebből  $\begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 0 \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ -1 & 1 & 0 \end{pmatrix}$  és  $\begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = 0$ . Így az  $i'$ -re vonatkozó összegzés 0-t ad, mert  $t_{1'-1'} = t_{-1'1'}$ . Tehát

$$c_{ik}^1 = 0 \quad (7.7b)$$

c)  $j=2$ . Ekkor ugyancsak (F. 17) alapján  $\begin{pmatrix} 1 & 1 & 2 \\ i' & -i' & 0 \end{pmatrix} = \frac{2}{\sqrt{5!}} (2 - |i'|)$  és az  $i'$ -re vonatkozó összegzés elvégzése után a szórási tenzor szimmetrikus komponensére:

$$c_{ik}^2 = \sqrt{(2K_1+1)(2K_2+1)} \sum_n (-1)^n \begin{pmatrix} 1 & 1 & 2 \\ i & k & n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} K_2 & 2 & K_1 \\ -M_2-n & M_1 & \end{pmatrix} \begin{pmatrix} K_2 & 2 & K_1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \cdot \sqrt{\frac{5!}{3!^2}} (t_{\parallel} - t_{\perp}) \quad (7.7c)$$

adódik. A következőkben áttérünk a szórási hatáskeresztmetszet szögfüggő részének meghatározására. (6.6) alapján a hatáskeresztmetszet így is írható:  $d\sigma = c_{ik} \cdot c_{lm}^*$ .

$\cdot e_i'^* e_k e_l' e_m^* \frac{\omega \omega'^3}{c^4} d\Omega'$ . A megfigyelhető szórt intenzitás ebből oly módon határozható meg, hogy a kezdeti rotációs állapotokra átlagolunk, a végső rotációs állapotokra pedig felösszegezzük a fenti kifejezést, tehát a következő mennyiséget kell kiszámítani:

$$c_{iklm} = \frac{1}{2K_1+1} \sum_{M_1 M_2 K_2} c_{ik} c_{lm}^*. \quad (7.8)$$

Helyettesítsük be ide (7.3)-at és (7.5)-öt, ekkor a következő kifejezést kapjuk:

$$c_{iklm} = \sum_{\substack{jn j'n' \\ i' k' \\ M_1 M_2 K_2}} (2K_2+1)(2j+1)(2j'+1) \begin{pmatrix} 1 & 1 & j \\ i & k & n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 & j' \\ l & m & n' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 & j \\ i' & -i' & 0 \end{pmatrix} \times \\ \times \begin{pmatrix} 1 & 1 & j' \\ k' & -k' & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} K_2 & j & K_1 \\ -M_2 & -n & M_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} K_2 & j' & K_1 \\ -M_2 & -n' & M_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} K_2 & j & K_1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \times \\ \times \begin{pmatrix} K_2 & j' & K_1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} t_{i'-i'} t_{k'-k'}. \quad (7.9)$$

Az  $M_1$  és  $M_2$ -re vonatkozó összegzés (F. 15) alapján könnyen elvégezhető és eredményként  $\delta_{jj'} \delta_{nn'} \frac{1}{2j+1}$  adódik.  $j$  lehetséges értékei most is 0, 1 és 2 lesznek és a (7.7)-es formulák levezetéséhez hasonlóan végezhető el az  $i'$  és  $k'$  szerinti összegzések. (7.7b)-hez hasonlóan  $j=1$  most sem ad járulékot, így végül  $c_{iklm}$  két részből tevődik össze:  $c_{iklm}^0$ - és  $c_{iklm}^2$ -ből ( $j=0$  és  $j=2$ -nek megfelelően).



$c_{iklm}^2$ -ben még a következő két független összegzés elvégzése maradt hátra:  $\sum_{K_2} (2K_2 + 1) \times$   
 $\times \begin{pmatrix} K_2 & j & K_1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2$  és  $\sum_n \begin{pmatrix} 1 & 1 & 2 \\ i & k & n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 2 \\ l & m & n \end{pmatrix}$ . A háromszög egyenlőtlenség alapján  
 $K_2$  lehetséges értékei:  $K_2 = K_1 - 2$ ;  $K_1 - 1$ ;  $K_1$ ;  $K_1 + 1$ ;  $K_1 + 2$ . (F. 13) szerint azok  
a tagok, ahol a felső indexek összege páratlan, nem adnak járulékot, így az összeg-  
ben végül a  $K_2 = K_1$ ;  $K_1 \pm 2$  értékeket kell figyelembe vennünk. (F. 18) szerint kiszá-  
mítva ezt a három tagot és az összegüket képezve:

$$\sum_{K_2} (2K_2 + 1) \begin{pmatrix} K_2 & 2 & K_1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2 = 1 \quad (7.10)$$

adódik. Az  $n$ -re vett összegzés pedig (F. 14) alapján végezhető el. Így végül  $c_{iklm} =$   
 $= c_{iklm}^0 + c_{iklm}^2$ , ahol:

$$c_{iklm}^0 = (-1)^{i+l} \delta_{i,-k} \delta_{l,-m} \frac{1}{9} (t_{\parallel} + 2t_{\perp})^2 \quad (7.11a)$$

és:

$$c_{iklm}^2 = \left\{ 2\delta_{il} \delta_{km} - (-1)^{i+l} \frac{2}{3} \delta_{i,-k} \delta_{l,-m} - (-1)^{i+l} [\delta_{k,-(i+1)} \delta_{m,-(l+1)} + \right. \\ \left. + i\delta_{i,-k} \delta_{l,-m} + \delta_{k,1-i} \delta_{m,1-l}] \right\} \frac{1}{15} (t_{\parallel} - t_{\perp})^2. \quad (7.11b)$$

A differenciális hatáskeresztmetszet kifejezésébe helyettesítve a (7.11) formulákat és felhasználva (F. 21)-et, végülis a következő kifejezést kapjuk:

$$d\sigma = \left\{ \frac{1}{9} (t_{\parallel} + 2t_{\perp})^2 |\mathbf{e}'^* \mathbf{e}|^2 + \frac{1}{15} (t_{\parallel} - t_{\perp})^2 \left[ 1 + |\mathbf{e}' \mathbf{e}|^2 - \frac{2}{3} |\mathbf{e}'^* \mathbf{e}|^2 \right] \right\} d\Omega'. \quad (7.12)$$

Ez a formula tartalmazza mind a szögfüggésre, mind pedig a polarizációfüggésre vonatkozó információt. A teljes hatáskeresztmetszet, amit (7.12)-ből a szórt foton irányára vett integrálással és a két lehetséges polarizációs irányra vett összegzéssel kapunk meg, a következő lesz:

$$\sigma_{\text{tot}} = \frac{8\pi}{9} \left\{ \frac{1}{3} (t_{\parallel} + 2t_{\perp})^2 + \frac{2}{3} (t_{\parallel} - t_{\perp})^2 \right\}. \quad (7.13)$$

A fényszórás kiválasztási szabályai a (7.4) sorfejtés alapján könnyen megállapíthatók. Skaláris szórás esetén (v. ö. (7.7a)) az átmenet csak azonos szimmetriájú állapotok között lehet, tehát a skaláris Rayleigh-szórás mindig koherens. A szimmetrikus szórás kiválasztási szabályai megegyeznek az elektromos kvadrupólátmenetek kiválasztási szabályaival. Az itt járulékot nem adó antiszimmetrikus szórásra pedig a mágneses dipólmomentum kiválasztási szabályai érvényesek, ui. mindkettőt axiálvektor írja le. Vezessük be a depolarizáció fokát a kísérletekkel összhangban a következő módon [30]: Válasszuk a laboratóriumi rendszer  $z$  tengelyét a beeső fény terjedésének ( $\mathbf{k}$ ) irányába, ekkor a beeső fény az  $xy$  síkban lesz polarizált. A megfigyelés iránya ( $\mathbf{k}'$ ) legyen az  $xy$  síkban. A szórt fény két polarizációs komponenset tartalmaz: egyik komponens az  $xy$  síkban (intenzitása  $I_{\parallel}$ ), másik kompo-



nens a  $\mathbf{k}\mathbf{k}'$  síkban (intenzitása  $I_{\perp}$ ) polarizált. A depolarizáció fokát a következőképpen értelmezzük:  $\varrho = \frac{I_{\perp}}{I_{\parallel}}$ . Természetes fény esetére (7.12)-ből a beeső fény  $\mathbf{e}, \mathbf{e}^*$  polarizációjára vett átlagolással:

$$\varrho_n = \frac{6\beta^2}{5\alpha^2 + 7\beta^2}; \alpha = t_{\parallel} + 2t_{\perp}, \beta = t_{\parallel} - t_{\perp}; \quad (7.14)$$

lineárisan polarizált fény esetén (és  $\mathbf{k}' \perp \mathbf{e}$ ) a depolarizáció foka:  $\varrho_l = \frac{\varrho_n}{2 - \varrho_n}$ . Rayleigh-szórás esetén mindig fennáll, hogy  $\alpha > 0$  és a depolarizáció foka csak a  $\chi = \frac{\beta}{\alpha}$  anizotropia faktortól függ. Értéke maximális, ha a molekula maximálisan anizotrop, azaz  $\chi = 1$ . Ekkor  $\varrho_n = \frac{1}{2}$  és  $\varrho_l = \frac{1}{3}$ . Raman-szórás esetén előfordulhat, hogy csak teljesen anizotrop szórás lép fel ( $\alpha = 0$ ) és a depolarizáció foka ilyen esetben maximális:  $\varrho_n = \frac{6}{7}$ ;  $\varrho_l = \frac{3}{4}$ . Általában  $\alpha \neq 0$  és ilyenkor a depolarizáció foka 0 és a maximális értéke között van:  $0 < \varrho_n < 6/7$ ;  $0 < \varrho_l < 3/4$ . A szög- és polarizációfüggés meghatározása után áttérünk a szórási tenzorban szereplő, és a szórócentrum konkrét anyagi minőségétől függő  $t_{ik}$  tenzorkomponensek meghatározására.

#### 8. §. A $t_{ik}$ tenzor meghatározásának problémái

Az előző paragrafusban a kétatomos molekulán történő fényszórás amplitúdó és hatáskeresztmetszet meghatározásának problémáját visszavezettük egy szög- és polarizációfüggő kifejezés, valamint a molekulához rögzített koordináta-rendszerben értelmezett, és így forgást már nem tartalmazó, tehát egyszerűbb szerkezetű  $t_{ik}$  tenzor meghatározására. A feladat első részét tartalmazza a 7. § és a levezetés során az is kitért, hogy szimmetria okokból a fényszórásban csak két független mennyiség:  $t_{\parallel}$  és  $t_{\perp}$  játszik szerepet. A szokásos eljárások vagy egyensúlyi magtávolságra határozzák meg a  $t$  mátrixelemeket [31], vagy — és ez a jobbik eset — néhány rögzített magtávolságra és utána a megfelelő vibrációs hullámfüggvények segítségével ezekre átlagolnak [32]. Schulman [33]  $\omega = 0$ -ra megmutatta, hogy ezek az eljárások csak közelítő jellegűek, és a sztatikus ( $\omega = 0$ ) amplitúdó értékét milyen módon lehet egzaktul meghatározni. A továbbiakban a Schulman által sztatikus esetre elvégzett tárgyalást fogjuk követni, és ennek során megmutatjuk, hogy a dinamikus  $t$  tenzorra ( $\omega \neq 0$ ) már nem adhatók meg olyan, viszonylag egyszerű sorfejtésben alapuló előállítások, mint a sztatikus esetben. A  $t_{ik}$  szórási tenzor  $t_{\parallel}$  komponensével fogunk foglalkozni, mert az esetek nagy részében a szórási folyamathoz a párhuzamos komponens adja a döntő járulékot ( $t_{\parallel} > t_{\perp}$ ). A  $t_{\parallel}$  tenzorkomponens kifejezése (7.3) és (6.5) alapján:

$$t_{\parallel}^{(21)} = \sum_{n A_n v_n} \langle v_{n_2} | \langle n_2 A_2 | d_0 | n A_n \rangle | v_n \rangle \langle v_n | \langle n A_n | d_0 | n_1 A_1 \rangle | v_{n_1} \rangle \times \\ \times \left[ \frac{1}{E_{v_n}^n - E_{v_{n_1}}^{n_1} - \hbar\omega} + \frac{1}{E_{v_n}^n - E_{v_{n_2}}^{n_2} + \hbar\omega} \right]. \quad (8.1)$$



Itt  $|n_1 A_1\rangle$  a kezdőállapot elektronhullámfüggvénye,  
 $|v_{n_1}\rangle$  a kezdőállapot vibrációs hullámfüggvénye,  
 $E_{v_1}^{n_1}$  a kezdőállapot energiája.

Az indexnélküli, ill. a kettes indexű mennyiségek ugyanazt jelentik a közbenső, ill. végállapotra. Ugyanazokat az egyszerűsítéseket tesszük meg, mint az előző §-ban, azaz az elektronalapállapothoz tartozó vibrációs termeken történő szórás-folyamatokat vizsgálunk, tehát  $|n_1 A_1\rangle = |n_2 A_2\rangle = |0\rangle$ . Vezessük be a következő jelölést:  $\langle n A_n | d_0 | 0 \rangle = \langle 0 | d_0 | n A_n \rangle = f^{(n)}$  (ez megtehető, mivel ha az állapot nem elfajult, valós vektor mátrixelemei mindig valóssá tehetők).  $v_{n_1}$  és  $v_{n_2}$  jelölésből is elhagyjuk az  $n$  indexet (mindkettő az elektronalapállapothoz tartozó vibrációs állapotot jelöl). Ha mármost a kezdő és vég vibrációs állapot is megegyezik, akkor Rayleigh-szórásról beszélünk [10], aminek a szórási tenzora megegyezik az adott állapot polarizálhatóságával, ha pedig  $v_1 \neq v_2$  (a kezdő és végállapotok különbözőek), akkor vibrációs Raman-szórásról beszélünk. A mondott jelöléseket és feltételeket bevezetve, a  $t_{||}^{(21)}$  tenzorkomponens így írható:

$$t_{||}^{(21)} = \sum_{n, v_n} \langle v_2 | f^{(n)} | v_n \rangle \langle v_n | f^{(n)} | v_1 \rangle \left\{ \frac{1}{E_{v_n} - E_1 - \hbar\omega} + \frac{1}{E_{v_n} - E_2 + \hbar\omega} \right\}. \quad (8.1a)$$

A (8.1) előállításban a molekuláris hullámfüggvényre a B—O közelítést már explicite kihasználtuk. Mivel a 3. § alapján  $|v\rangle = \chi_v(r)$  vezessük be az  $r$  függő szórási tenzort a következőképpen:  $t_{||}^{(21)} = \int \chi_{v_2}(r) t_{||}(r, r') \chi_{v_1}(r') dr dr'$ ; ahol:

$$t_{||}(r, r') = \sum_n f_{(r)}^{(n)} \sum_{v_n} \left\{ \frac{1}{E_{v_n} - E_1 - \hbar\omega} + \frac{1}{E_{v_n} - E_2 + \hbar\omega} \right\} \chi_{v_n}(r) \chi_{v_n}(r') f_{(r')}^{(n)}. \quad (8.2)$$

Mivel a  $\chi_{v_n}(r)$  függvények az (1.6) Schrödinger-egyenletet elégítik ki, és emellett teljes rendszert is alkotnak ( $\sum_{v_n} \chi_{v_n}^n(r) \chi_{v_n}^n(r') = \delta(r - r')$ ), a (8.2) egyenlet a következő alakra hozható:

$$t_{||}(r, r') = \sum_n f_{(r)}^{(n)} \{ (K_M + \varepsilon_n(r) - E_1 - \hbar\omega)^{-1} + (K_M + \varepsilon_n(r) - E_2 + \hbar\omega)^{-1} \} f_{(r')}^{(n)}. \quad (8.3)$$

Vezessük be a  $G_i(r)$ ,  $i=1, 2$  függvényt a következő definícióval [34]:

$$[K_M + \varepsilon_n(r) - E_i \pm \hbar\omega] G_i(r) = f_{(r)}^{(n)} \chi_i(r), \quad (8.4)$$

aminek segítségével (8.1) a következőképpen alakítható át:

$$t_{||}^{(21)} = \sum_n \{ \langle v_2 | f^{(n)} | G_1 \rangle + \langle G_2 | f^{(n)} | v_1 \rangle \} \quad (8.5)$$

(8.1), ill. (8.2) vagy a (8.2)-nek megfelelő (8.5) átírás a probléma egzakt megoldását jelentik. A legtöbb esetben azonban vagy a (8.1)-ben szereplő perturbációs sor felösszegezése ütközik akadályokba, vagy pedig a (8.4) differenciálegyenlet megoldása nem ismert, ezért (8.1)-et sorfejtés alakjában állítják elő. Egy lehetséges eljárás a Franck—Condon-elvből [35] adódik, amely azt mondja ki, hogy elektronátmenetekenél



a magok helyzetváltoztatásának valószínűsége kicsiny. Ezért (8.1) nevezőjében  $E_{v_n}^n$ -et  $\varepsilon_n(r_0)$ -lal közelítik, ahol  $r_0$  az alapállapot egyensúlyi magtávolsága. Azaz:

$$(E_{v_n}^n - E_1 - \hbar\omega)^{-1} = (\varepsilon_n(r_0) - E_1 - \hbar\omega)^{-1} \left[ 1 + \frac{\varepsilon_n(r_0) - E_{v_n}^n}{\varepsilon_n(r_0) - E_1 - \hbar\omega} + \dots \right]. \quad (8.6)$$

Ezt az előállítást (8.1)-be helyettesítve:  $t_{||}^{(21)} = t_{FC}^0 + t_{FC}^1 + \dots$  ahol:

$$t_{FC}^0 = \sum_n \langle v_2 | f^{(n)} \{ (\varepsilon_n(r_0) - E_1 - \hbar\omega)^{-1} + (\varepsilon_n(r_0) - E_2 + \hbar\omega)^{-1} \} f^{(n)} | v_1 \rangle. \quad (8.7)$$

Igen nehézkes azonban a következő közelítés kiszámítása, ami a F—C sorfejtésnél általában még jelentős ( $\sim 20\%$ ). Másik lehetséges sorfejtés a Born—Oppenheimer-sorfejtés (nem tévesztendő össze a molekuláris hullámfüggvényekre alkalmazott Born—Oppenheimer-közelítéssel). Ekkor (8.1)-ben a nevezőt a következő alakban állítjuk elő:

$$(E_{v_n}^n - E_1 - \hbar\omega)^{-1} = (\varepsilon_n(r) - \varepsilon_0(r) - \hbar\omega)^{-1} \left\{ 1 + \frac{(\varepsilon_n(r) - E_{v_n}^n) - (\varepsilon_0(r) - E_1)}{\varepsilon_n(r) - \varepsilon_0(r) - \hbar\omega} + \dots \right\} \quad (8.8)$$

és ezt az alakot (8.1)-be helyettesítve a következő eredményre jutunk:  $t_{||}^{21} = t_{B0}^0 + t_{B0}^1 + \dots$ , ahol:

$$t_{B0}^0 = \sum_n \langle v_2 | f^{(n)} \{ (\varepsilon_n(r) - \varepsilon_0(r) - \hbar\omega)^{-1} + (\varepsilon_n(r) - \varepsilon_0(r) + \hbar\omega) \} f^{(n)} | v_1 \rangle. \quad (8.9)$$

Ez a sorfejtés első pillanatban elég furcsának tűnhet, hiszen egy számot függvények szerint fejtünk sorba. Azonban (8.1)-ben a  $v_n$  index a vibrációval függ össze és ily módon szerepe rokon az  $r$ -ével. Végso soron mind az F—C mind a B—O sorfejtés azt a célt szolgálja, hogy megszabaduljunk a közbelső állapotban a  $v_n$  vibrációs indexekre vett összegzéstől. A (8.9) kifejezés érdekessége, hogy bár a klaszikus fizikai kifejezés pontos analogonja és sokáig egzaktak tartották (pl. [10], [36]), a fentiek alapján mégiscsak közelítésnek bizonyul. Ami a két sorfejtés konvergenciáját illeti, kimutatható (l. pl. [33]), hogy az F—C sorfejtés sokkal lassabban konvergál, mint a B—O sorfejtés és emellett  $t_{FC}^0 + t_{FC}^1 + \dots \approx t_{B0}^0$ . Elég tehát a B—O sorfejtés konvergenciáját megvizsgálni részletesebben. Az  $\omega=0$  határesetben (sztatikus szórás amplitúdó) a (8.8) sorfejtés igen gyorsan konvergál és már  $t_{B0}^0$  kielégítő pontossággal adja vissza az egzakt (8.1), ill. (8.5) formulából számolt eredményt. A sorfejtésnek a fenti általánosítása azonban formális és nem megengedett a következő okokból. Vannak olyan energiatermek, melyekre  $E_i(r) \rightarrow E_j(r)$  ha  $r \rightarrow 0$  v.  $r \rightarrow \infty$ . Általában véve tehát minden  $\omega$  értékhez tartozik olyan  $r$  és megfordítva, minden  $r$  értékhez olyan  $\omega$ , ahol a nevező divergál. Ezért  $\omega \neq 0$  esetben a sorfejtés nem megengedett, feltétlenül az egzakt (8.1) vagy (8.5) formulákat kell használni.

## 9. §. $H_2^+$ molekulán végmenő Rayleigh- és Raman-szórás dinamikus $t_{||}$ tenzora

A következőkben áttérünk a  $t_{||}$  szórás tenzorral kapcsolatos eredmények ismertetésére, konkrét modellként a legegyszerűbb molekulát, a  $H_2^+$ -t választva. Érdekes, hogy még ennél az egyszerű molekulánál is a numerikus eredmények száma viszonylag kevés és azok is meglehetősen pontatlanok. Először Adamov és Rebane [37] határozták meg a  $H_2^+$ -ra az alapállapot polarizálhatóságot (sztatikus Rayleigh-



szórási tenzor,  $\omega=0$  eset) variációs módszerrel, abban a közelítésben, hogy  $t_{B_0}^0$ -ban a vibrációs alapállapotra történő átlagolás helyett az  $r=r_0$  (egyensúlyi magtávolság) értéket helyettesítették. A dinamikus polarizálhatóságot először Davidkin és Rapoport [38] határozták meg, mégpedig oly módon, hogy szintén  $r=r_0$ -ra „kvantum-defekt” (l. pl. [39]) módszerrel meghatározták az elektron Green-függvényt és (8.9)-ben a vibrációs állapotra vett átlagolást szintén  $r=r_0$ -lal helyettesítették (két rögzített centrum-közelítés). Eredményül azt kapták, hogy az alapállapot polarizálhatóság, azaz a Rayleigh-szórás szórási amplitúdója sztatikus határesetben  $t_{\parallel}(\omega=0)=5.25$  (atomi egységekben mérve, ahol a  $t$  tenzor mértékegysége  $a_0^3$ ;  $a_0$  a Bohr-sugár) és az első rezonanciánál, azaz az  $1\sum_g \rightarrow 2\sum_u$  átmenet energiájánál az amplitúdó divergál. A következő numerikus értékeket Schulman [33] adta meg, a sztatikus polarizálhatóságra vonatkozóan. Összehasonlításokat végzett az F—C és B—O sorfejtés és a (8.1), valamint (8.5) képletek által meghatározott egzakt értékek között. Mint a (8.9) formula utáni megjegyzésből kitűnik, a B—O sorfejtés nem is általánosítható a dinamikus ( $\omega \neq 0$ ) esetre, csak ha az  $r=r_0$  további közelítést is bevezetjük, mint a fentidézett [37] és [38]-ban. Schulman azt az eredményt tapasztalta, hogy a B—O sorfejtés kb. 10%-ra tér el a (8.5) alatti pontos eredménytől. Amikor a (8.1) formulában csak az alapállapot és az első gerjesztett elektronállapot közti átmenetet vette figyelembe ( $1\sum_g \rightarrow 2\sum_u$ -t), akkor az így kapott eredmény az egzakt eredménnyel egybeesett. Ez a  $H_2^+$  molekula egy igen érdekes tulajdonsága: az elektron alapállapothoz tartozó vibrációs termekre értelmezett  $t_{\parallel}$ -hoz a döntő járulék az első gerjesztett elektronállapotba történő átmenetből származik, a többi elektronállapot járuléka elhanyagolhatóan csekély. Ez annak következménye, hogy az  $1\sum_g \rightarrow 2\sum_u$  átmenethez tartozó oszcillátorerősség értéke megegyezik a Thomas—Kuhn-összegszabályból kijövő értékkel. A Schulman által adott pontosnak tekinthető érték a  $H_2^+$  molekula vibrációs alapállapotának sztatikus polarizációjára  $t_{\parallel}(\omega=0)=5.78$ .

Tehát a helyzet összefoglalva a következő:  $H_2^+$  esetén ismert a vibrációs alapállapotra (elektron-alapállapotban) a sztatikus polarizálhatóság pontos értéke, ami a szórási tenzornak  $\omega=0$ -ra vett határértéke,  $t_{\parallel}(\omega=0)$ , valamint egy eredmény a frekvenciafüggő (dinamikus)  $t_{\parallel}(\omega)$ -ra (Davidkin és Rapoport), amely azonban  $\omega \rightarrow 0$ -ra a pontos értéktől kb. 10%-ra eltér. Egyáltalán nem ismeretesek a  $t_{\parallel}$  értékei Raman-szórásra (amikor a vibrációs kezdő és végállapot különbözik) és a gerjesztett vibrációs állapotokon végzett Rayleigh-szórásra (ekkor  $t_{\parallel}$  a gerjesztett állapot polarizálhatóságával egyezik meg). Szükséges tehát az alap- és gerjesztett vibrációs állapotok polarizálhatósági tenzorának pontosítása, ill. meghatározása és a Raman-típusú szórási folyamatok szórási tenzorának meghatározása. A Rayleigh-szórásra vonatkozóan olyan eredményt, amely elég széles frekvenciatartományban megbízható értéket ad, először mi közöltünk [40], egy a (8.1) formulán és az 5. § eredményein alapuló módszer segítségével, a Raman-szórásra vonatkozó eredményeket pedig a jelen disszertáció tartalmazza.

A  $H_2^+$  molekula elektron-alapállapotához tartozó különböző vibrációs termeken történő szórások amplitúdójának meghatározásához a fentiek szerint elegendő figyelembe venni az első gerjesztett elektronállapotba történő átmeneteket. Az ezen  $1\sum_g \rightarrow 2\sum_u$  elektronátmenethez tartozó  $d_0$  dipólmomentum komponens meghatározásával nem foglalkozunk, mivel annak értéke, mint az  $r$  magtávolság függvénye, ismert (Bates [41]). Hasonlóképpen nem foglalkozunk az elektronenergia meghatározásával az alap- és gerjesztett állapotban, mivel ennek értéke szintén az  $r$  magtávolság függvényében az irodalomban megtalálható ([12], [13]). Az 5. §-ban leírt módon



az adott energiafüggvényeket Morse-potenciállal közelítettük és így a vibrációs hullámfüggvényekre, valamint energiákra explicit, analitikus kifejezést nyertünk. Megjegyezzük, hogy a vibrációs energia és hullámfüggvény a  $K$  rotációs kvantumszámtól igen gyengén függ, ezért jó közelítésben a  $K$  függés elhanyagolható ( $K=0$ -t helyettesítünk az (5.3) egyenletbe). A fenti elektronátmenethez tartozó dipólmátrixelem kifejezését a következő függvénnyel írjuk le:

$$d(r) = d_1 y^{x_1} + d_2 y^{x_2} + \dots, \quad (9.1)$$

ahol  $y$  az 5. §-ban bevezetett változó. (9.1) mind az egyensúlyi magtávolság közelében, mind  $r$  nagyobb értékeire jól közelíti  $d(r)$ -et, ugyanis (9.1)-ből:

$$d(r) = d(r_0) + \frac{d'(r_0)}{\alpha x} [1 - e^{-\alpha x(r-r_0)}] \approx d(r_0) + d'(r_0)(r-r_0) - \frac{d'(r_0)\alpha x}{2} (r-r_0)^2. \quad (9.2)$$

Ezt a kifejezést akkor nyerjük (9.1)-ből, ha  $d_{i>2}=0$ , és a  $d_1 > -d_2 > 0$  paramétereket a  $d(r_0)$  és  $d'(r_0)$  paraméterek függvényében fejezzük ki (9.2)-ben. (8.1) kiszámítása ebben az esetben a következő kifejezés meghatározására vezethető vissza:

$$t_{||}^{(21)} = \int_0^\infty r^2 dr r'^2 dr' \chi_2(r) d(r) d(r') \chi_1(r') \times \\ \times \int dE' \chi_{E'}(r) \chi_{E'}(r') \{ (E' - E_1 - \hbar\omega)^{-1} + (E' - E_2 + \hbar\omega)^{-1} \}. \quad (9.3)$$

(9.3) felírásánál már explicite figyelembe vettük azt a tényt, hogy  $t_{||}$ -hoz a járulékot az első gerjesztett elektronállapot adja, így az elektronindexekre vonatkozó összegzés elhagyható, továbbá, hogy ez az állapot disszociál (az elektronenergia a távolság függvényében monoton csökken) és így a vibrációs energiaspektrum a közbenső állapotokban folytonos. A  $\chi_E$  függvények az energiaskálára vannak normálva:  $\int r^2 dr \chi_E(r) \chi_{E'}(r) = \delta(E - E')$ . A célunk jobban megfelelő alakot kapunk, ha az  $r$  változóról áttérünk az 5. §-ban bevezetett  $y$  változóra és felhasználjuk a folytonos, ill. diszkrét spektrumhoz tartozó hullámfüggvények (5.8), ill. (5.9) alakját. Az  $y$  változó szerinti integrált kiterjesztjük  $+\infty$ -ig, mivel ez sokban egyszerűsíti a kifejezéseket és negatív  $r$ -ekre a Whittaker-függvény exponenciálisan csökken. A függvények argumentumában szereplő  $\beta_i$  paramétereket egyenlőnek választjuk ( $\beta = \beta_0 = \beta_1$ ) és  $t_0 = 1$ . (9.3)-ban a kapcsos zárójelben levő tagok közül az első rezonanciaviselkedést mutat. Vezessük be ezért ennek nevezőjébe az adiabatikus bekapcsolásból eredő  $-i\gamma$  tagot. Ekkor az  $\frac{1}{E' - E_1 - \hbar\omega - i\gamma} = \frac{P}{E' - E_1 - \hbar\omega} + \frac{i\pi\delta(E' - E_1 - \hbar\omega)}{\sqrt{E'}}$  egyenlet értelmében az  $E'$  szerinti integrál egy főértékre és egy imaginárius részre bontható. A fenti átalakításokat (9.3)-ban elvégezve  $t_{||}^{(21)}$ -re a következő kifejezést kapjuk:

$$t_{||}^{(21)} = \frac{1}{2\pi\alpha\sqrt{2}} \int_{-\infty}^\infty dy dy' y^{-2} y'^{-2} \chi_2^0(y) d(y) d(y') \chi_1^0(y') \left[ \int \frac{dE}{\sqrt{E'}} \chi_{E'}^1(y) \chi_{E'}^1(y') \times \right. \\ \left. \times \left\{ \frac{1}{E' - E_1 - \hbar\omega} + \frac{1}{E' - E_2 + \hbar\omega} \right\} + \frac{i\pi}{\sqrt{E'}} \chi_{E_1 + \hbar\omega}^1(y) \chi_{E_1 + \hbar\omega}^1(y') \right], \quad (9.4)$$



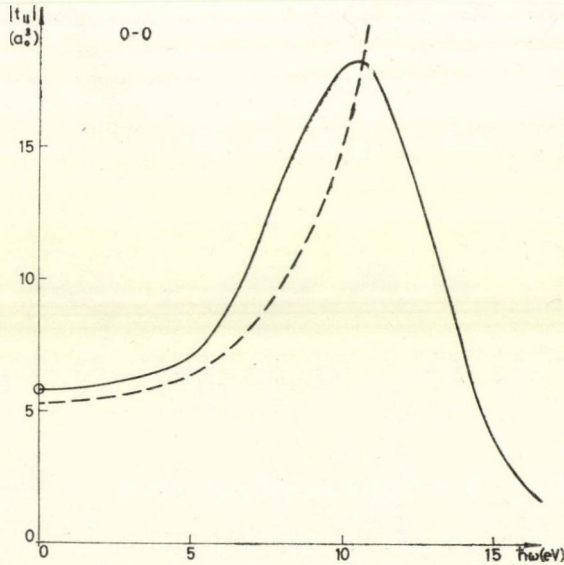
ahol most már valamennyi dimenzióval rendelkező kifejezés atomi egységekben értendő,  $\oint$  a főértékintegrál jelölése. Definíáljuk most az  $I_i(E)$  mennyiséget a következőképpen:

$$I_i(E) = \int \frac{dy}{y^2} \chi_i^0(y) d(y) \chi_E^1(y) \quad (9.5)$$

$i=1,2$ . Ezen mennyiség segítségével  $s$  (9.4) egyenlet a következő egyszerűbb alakra hozható:

$$t_{||}^{(21)} = \frac{1}{2\pi\alpha\sqrt{2}} \oint \frac{dE'}{\sqrt{E'}} I_1(E') I_2(E') \{(E' - E_1 - \hbar\omega)^{-1} + (E' - E_2 + \hbar\omega)^{-1}\} + \\ + \frac{i}{2\alpha\sqrt{2}} \frac{I_1(E_1 + \hbar\omega) I_2(E_1 + \hbar\omega)}{(E_1 + \hbar\omega)^{1/2}}. \quad (9.6)$$

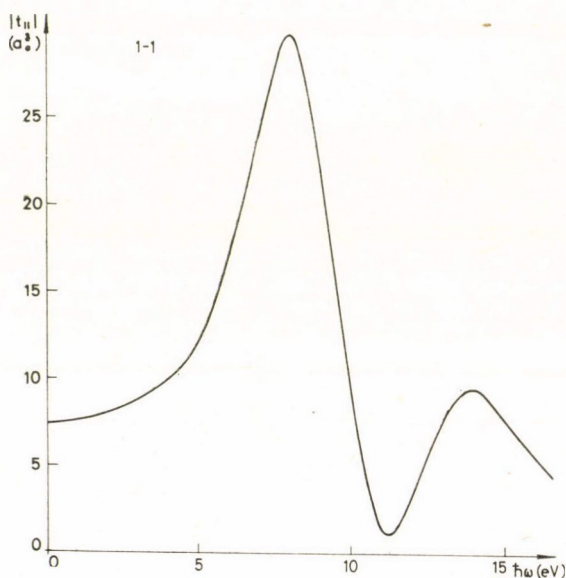
A fenti  $I_i(E)$  integrálok analitikusan kifejezhetők a Whittaker-függvényekre vonatkozó táblázatok segítségével (pl. [26], [27]). Analitikus alakjukat [42] (38), (41) és (42) adja meg. A (9.2)-ben szereplő  $d(y)$ -t meghatározó három numerikus állandó értéke:  $d(r_0)=1,05$ ;  $d'(r_0)=0,396$ ;  $x=-0,055$ . Így végül a (9.6)-ban előforduló valamennyi kifejezés ismert és a  $t_{||}^{21}(\omega)$  tenzorkomponens meghatározását egyetlen  $E'$  szerinti integrál kiszámítására vezettük vissza. Ezt a (9.6)-ban



4. ábra.  $H_2^+$  vibrációs alapállapotának ( $v=0$ ) dinamikus polarizálhatósága a beeső foton energiájának függvényében. Szaggatottal a két rögzített centrumú közelítésben [38] számított eredményt ábrázoltuk, körrel pedig a sztatikus polarizálhatóság pontos értékét [33] jelöltük. Itt és a továbbiakban a polarizálhatóság és szórási amplitúdók értékeit atomi egységekben ( $a_0^3$ ) ábrázoltuk.

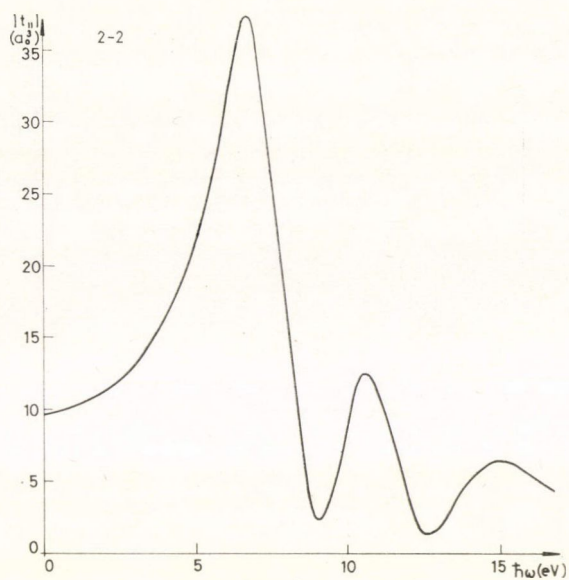


szereplő  $E'$  szerinti integrálást a moszkvai Lebegyev Fizikai Intézet BSzM—6 típusú számítógépén végeztük el az elektron-alapállapothoz tartozó vibrációs nívók, mint kezdeti- és végállapotok egy sorozatára. A számítások numerikus eredményei a 4-11. ábrákon vannak feltüntetve, ahol az egyes folyamatok szórási tenzorai  $t_{||}$  komponensének abszolút értékét ábrázoltuk a fotonenergia függvényében, atomi egységekben. A 4. ábra az eddigi egyetlen dinamikus polarizálhatóság számolás eredményét (Davidkin [38]) is feltünteti a vibrációs alapállapoton történő Rayleigh-szórásra, valamint Schulman [33] pontos eredményét a sztatikus polarizálhatóságra. Látható, hogy a rögzített magtávolságra vonatkozó, szaggatottal jelölt görbe a valószínűségi görbe alatt halad és rezonanciánál divergál. Az általunk kapott eredmény a sztatikus határesetben ( $\omega=0$ ) egybeesik az ábrán körrel jelölt pontos eredménnyel, rezonanciánál pedig maximumot mutat. Tehát amíg a rögzített magtávolságra vonatkozó számítás azt mutatja, hogy disszociációs átmenet csak egyetlen éles frekvenciánál lehetséges, a tényleges amplitúdóból (amely tehát a vibrációt is magába foglalja) meghatározható az a frekvenciatartomány, amelynél az átmenet jelentős. A többi ábrán az elektron-alapállapothoz tartozó gerjesztett vibrációs nívókon végbemenő Rayleigh-, ill. Raman-szórási amplitúdókra nyert numerikus eredményeket tüntettük fel. Ezek az eredmények újak, összehasonlításukhoz egyéb irodalmi adat nem áll rendelkezésre. A szórási amplitúdókból azonban a következő kvalitatív kép állapít-

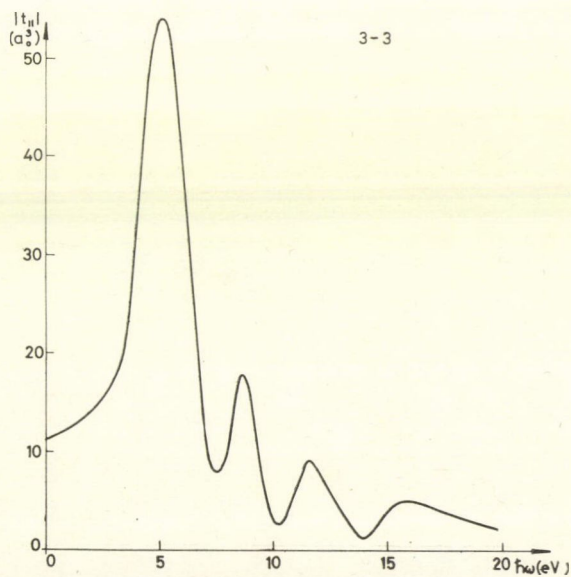


5. ábra.  $H_2^+$   $v=1$  vibrációs állapotának dinamikus polarizálhatósága. A két maximum annak felel meg, hogy a  $v=1$  állapotban a vibrációs hullámfüggvénynek két maximuma van, és a  $2^2 \Sigma_u$  elektronállapotba történő átmenet ezeknél a magtávolságoknál a legvalószínűbb. Teljesen hasonlóan értelmezhetők a soron következő ábrákon feltüntetett elméleti görbék maximumai is (Franck—Condon-elv).



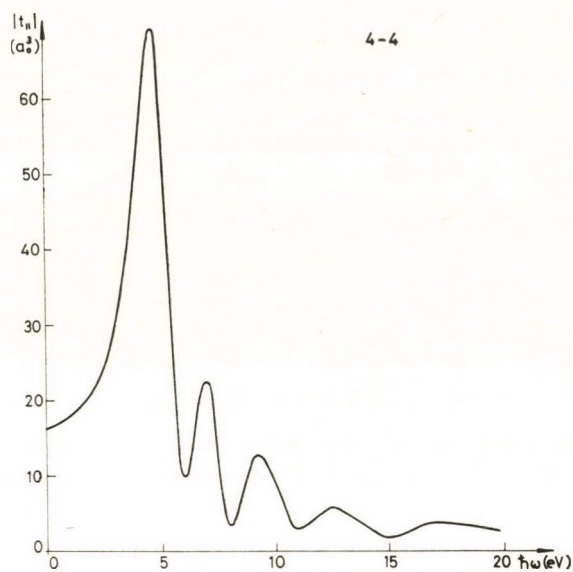


6. ábra.  $\text{H}_2^+$  molekula második gerjesztett vibrációs állapotának ( $v=2$ ) dinamikus polarizálhatósága.

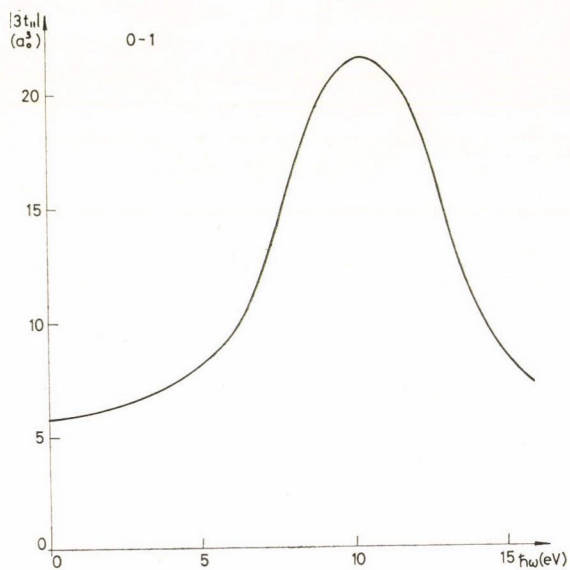


7. ábra.  $\text{H}_2^+$  molekula harmadik gerjesztett vibrációs állapotának ( $v=3$ ) dinamikus polarizálhatósága.



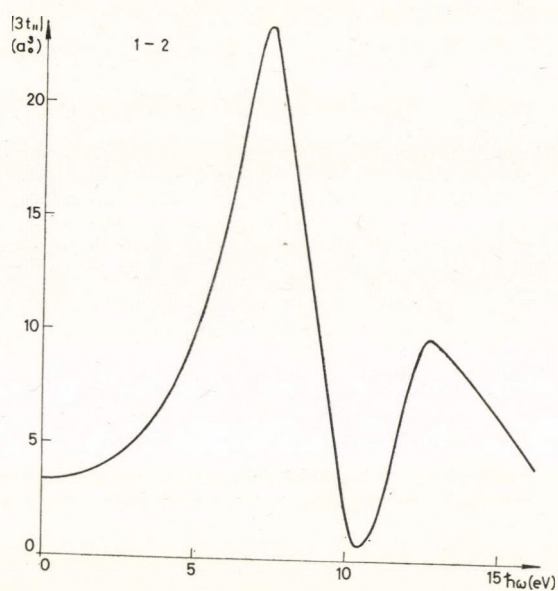


8. ábra.  $\text{H}_2^+$  molekula  $v=4$  vibrációs állapotának dinamikus polarizálhatósága

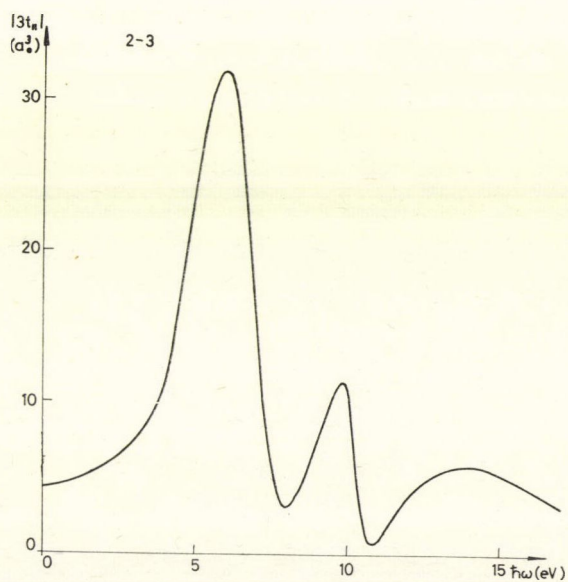


9. ábra.  $\text{H}_2^+$  molekula  $v=0$ ,  $v=1$  vibrációs nívói között végbemenő Raman-szórás szórási amplitúdója.





10. ábra.  $\text{H}_2^+$  molekula  $v=1$ ,  $v=2$  vibrációs sívói között végbemenő Raman-szórás amplitúdója.



11. ábra.  $\text{H}_2^+$  molekula  $v=2$ ,  $v=3$  vibrációs sívói között végbemenő Raman-szórás amplitúdója.



ható meg: olyan szórási folyamatnak nagy a valószínűsége, amelyben a foton-energia megegyezik az adott vibrációs hullámfüggvény valamely maximumánál történő átmenetenergiájával, azaz az elektronátmenetekre érvényes Franck—Condon-elv most az elektronátmeneten belüli vibrációs átmenetekre külön-külön teljesül.

### Összefoglalás és diszkusszió

Az értekezésben konstruktív módszert dolgoztunk ki homopoláros kétatomos molekulák vibrációs hullámfüggvényének meghatározására, mely az empirikusan meghatározható internukleáris potenciálra adott analitikus kifejezésen alapul. Ezen kívül az elméletileg meghatározható rotációs hullámfüggvények és a  $D_{MA}^K$  forgásmátrixok közötti egyszerű kapcsolat révén, a forgásmátrixokra jól kidolgozott algebra segítségével a kétatomos molekulákon végbemenő többfotonos folyamatok hatáskeresztmetszete szög- és polarizációfüggésének kiszámítására adtunk általános módszert. Megmutattuk, hogy pl. a fényszórás két független mennyiség kiszámítására vezethető vissza. Az analitikus internukleáris potenciál-modell segítségével ezek a független tenzorkomponensek numerikusan meghatározhatók és ezt a számítást a  $H_2^+$  molekulán végbemenő egy sorozat Rayleigh- és Raman-szórási folyamatra elvégeztük. Az irodalomból csak a  $H_2^+$  molekula elektron-alapállapotához tartozó  $v=0$  vibrációs alapállapotra vonatkozó adatok ismertek, mégpedig egy pontosnak tekinthető adat a sztatikus ( $\omega=0$ ) polarizálhatóságra, és néhány közelítő számítás a dinamikus polarizálhatóságra (melyek lényegében a magmozgást hanyagolták el), de ezek a sztatikus határesetben kb. 10%-ra eltértek az előbbi pontos értéktől. Az ezen adatokkal történő összehasonlítás megmutatta, hogy az általunk alkalmazott módszer gyakorlatilag teljesen pontosnak tekinthető. Ezen felül pedig meghatároztuk a vibrációs alapállapot dinamikus polarizálhatóságát, valamint egyéb vibrációs állapotokon végbemenő Rayleigh- és Raman-típusú szórásfolyamatok szórási amplitúdóját. A számítások jól mutatják az általunk bevezetett módszer hatékonyságát és a fenti folyamatokra kapott numerikus eredmények (melyeket a 4-11. ábrákon tüntetünk fel) az értekezés önálló, új eredményei. Remélhető, hogy a kísérleti technikának a lézerekkel megindult fejlődése lehetővé teszi az értekezésben kiszámított mennyiségek ilyen pontosságú megfigyelését is, és a további kísérleti és elméleti kutatás fontos szerepet fog játszani a fény-anyag kölcsönhatás vizsgálatában.

### KÖSZÖNETNYILVÁNÍTÁS

Ezúton mondok köszönetet

*Dr. Kroó Norbertnek*, aki támogatásával lehetővé tette a moszkvai Lebegyev Fizikai Intézetben töltött fél éves állami ösztöndíjas tanulmányutam létrejöttét, és hazaérkezésem után munkám iránt nagy érdeklődést tanúsított, amit az értekezés első (intézeti) opponense hálátlan szerepének elvállalásával is igazolt.

*Dr. I. I. Tugovnak*, akivel moszkvai tartózkodásom során együtt dolgoztam, érdeklődésemet a téma iránt felkeltette, és elsősorban a kétatomos molekulák vibrációjával kapcsolatban számos hasznos tanáccsal volt segítségemre.

*Dr. Rózsa Károlynak*, akivel a fényszórás kísérleti részéről és az elméleti és kísérleti eredmények interpretálásáról rendkívül hasznos diszkussziókat folytattunk.



### Függelék

A Függelék a 4. és 7. § eredményeinek levezetése során felhasznált forgásmátrixokra és  $3j$  szimbólumokra vonatkozó legfontosabb összefüggéseket tartalmazza.

Abból a követelményből, hogy egymáshoz képest  $\alpha, \beta, \gamma$  Euler-szögekkel elfordított koordinátarendszerek (2. ábra) a kvantummechanikai leírás szempontjából ekvivalensek legyenek a gömbfüggvények transzformációs tulajdonságaira:

$$Y_{jm}(\theta, \varphi) = \sum_{m'} D_{mm'}^j(\alpha, \beta, \gamma) Y_{jm'}(\theta', \varphi') \quad (\text{F.1})$$

adódik, ahol:

$$D_{m, m'}^j(\alpha, \beta, \gamma) = \langle jm' | e^{\frac{i}{\hbar} \gamma L_z} e^{\frac{i}{\hbar} \beta L_y} e^{\frac{i}{\hbar} \alpha L_z} | jm \rangle = e^{im\alpha} d_{mm'}^j(\beta) e^{im'\gamma} \quad (\text{F.2})$$

és

$$d_{mm'}^j(\beta) = \langle jm' | e^{\frac{i}{\hbar} \beta L_y} | jm \rangle \quad (\text{F.3})$$

és  $\theta, \varphi$ , ill.  $\theta', \varphi'$  az eredeti, ill. elforgatott rendszerben mért polárszögek. A  $D$  forgásmátrixnak ez a meghatározása megegyezik [22]-vel (kivéve az  $m \leftrightarrow m'$  indexcserét), de különbözik pl. [43]-tól, ahol a  $D^{-1}$ -et vezették be, vagy Wigner eredeti munkájától [21], ahol balsodrású koordinátarendszert alkalmaztak. A gömbfüggvények és a gömbi vektorkomponensek kapcsolata: egy  $r = (x, y, z)$  vektor komponensei gömbi koordinátákban:

$$r_{\pm 1} = \mp \frac{1}{\sqrt{2}} (x \pm iy); r_0 = z; r_m = \sqrt{\frac{4\pi}{3}} r Y_{1m}(\theta, \varphi). \quad (\text{F.4})$$

A skalárszorzat gömbi komponensekben kifejezve:

$$\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} = \sum_m (-1)^m a_m b_{-m} \quad (\text{F.4a})$$

A  $d_{mm'}^j(x)$ ,  $x = \cos \beta$  kifejezhető a Jacobi-polinomokkal:

$$d_{mm'}^j(x) = \left[ \frac{(j+m')!}{2^{2j} (j+m)! (j-m)! (j-m')!} \right]^{1/2} (-1)^{j-m'} (1+x)^{-\frac{m+m'}{2}} \times \\ \times (1-x)^{-\frac{m'-m}{2}} \left\{ \frac{d^{j-m'}}{dx^{j-m'}} [(1+x)^{j+m} (1-x)^{j-m}] \right\}. \quad (\text{F.5})$$

Szimmetriatulajdonságok:

$$d_{mm'}^j(\beta) = d_{m'm}^j(-\beta) = d_{-m'-m}^j(\beta) = (-1)^{m'-m} d_{mm'}^j(\beta). \quad (\text{F.6})$$

Ezekből

$$D_{mm'}^{j*}(\alpha\beta\gamma) = (-1)^{m'-m} D_{-m-m'}^j(\alpha, \beta, \gamma). \quad (\text{F.7})$$



Integrálösszefüggések és teljesség:

$$\int D_{m_1 m_1'}^{j_1*}(\alpha\beta\gamma) D_{m_2 m_2'}^{j_2}(\alpha\beta\gamma) \frac{d\alpha \sin \beta d\beta d\gamma}{8\pi^2} = \delta_{j_1, j_2} \delta_{m_1, m_2} \delta_{m_1', m_2'} \frac{1}{2j+1} \quad (\text{F.8})$$

$$\sum_{jmm'} (2j+1) D_{mm'}^{j*}(\omega) D_{mm'}^j(\omega') = \frac{1}{8\pi^2} \delta(\omega - \omega'); \quad \omega = \alpha, \beta, \gamma. \quad (\text{F.9})$$

Kapcsolat a gömbfüggvényekkel:

$$D_{m0}^j(\alpha, \beta, \gamma) = \left[ \frac{4}{2j+1} \right]^{1/2} Y_{jm}(\alpha, \beta). \quad (\text{F.10})$$

A  $D_{mm}^j(\alpha, \beta, \gamma)$  forgásmátrixokról megmutatható, hogy az impulzuszmomentum négyzetének sajátfüggvénye  $j(j+1)$  sajátértékkel és az  $L_z$  és  $L_\zeta$  operátoroknak is sajátfüggvénye  $m$ , ill.  $m'$  sajátértékkel (lásd 4. §).

A Wigner-féle  $3j$  szimbólum.

Ha két  $\mathbf{L}_1$  és  $\mathbf{L}_2$  impulzuszmomentumot összegzünk, az eredő impulzuszmomentum sajátfüggvényei az  $\mathbf{L}^2 = (\mathbf{L}_1 + \mathbf{L}_2)^2$  és  $L_z = L_{1z} + L_{2z}$  operátorokon kívül  $\mathbf{L}_1^2$  és  $\mathbf{L}_2^2$ -nek is sajátfüggvényei lesznek. A  $|j_1 j_2 jm\rangle$  sajátvektorok előállíthatók a  $|j_1 m_1\rangle |j_2 m_2\rangle$  szorzatbázis lineárkombinációiként:

$$|j_1 j_2 jm\rangle = \sum_{m_1 m_2} C_{j_1 m_1 j_2 m_2}^{jm} |j_1 m_1\rangle |j_2 m_2\rangle. \quad (\text{F.11})$$

Wigner vezette be [21], az így definiált  $C$  Clebsch—Gordan-koefficiensek helyett az indexekben több szimmetriát mutató  $3j$  szimbólumokat a következő definícióval:

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} = (-1)^{j_1 - j_2 - m_3} \frac{1}{\sqrt{2j_3 + 1}} C_{j_1 m_1 j_2 m_2}^{j_3 - m_3}. \quad (\text{F.12})$$

Az oszlopok permutációjára előjele a következőképpen változik:

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} j_2 & j_3 & j_1 \\ m_2 & m_3 & m_1 \end{pmatrix} = (-1)^{j_1 + j_2 + j_3} \begin{pmatrix} j_2 & j_1 & j_3 \\ m_2 & m_1 & m_3 \end{pmatrix}. \quad (\text{F.13})$$

Ortogonalitási tulajdonságok:

$$\sum_{j_3 m_3} (2j_3 + 1) \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1' & m_2' & m_3 \end{pmatrix} = \delta_{m_1 m_1'} \delta_{m_2 m_2'} \quad (\text{F.14})$$

$$\sum_{m_1 m_2} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3' \\ m_1 & m_2 & m_3' \end{pmatrix} = \frac{1}{2j_3 + 1} \delta_{j_3 j_3'} \delta_{m_3 m_3'}. \quad (\text{F.15})$$



Néhány speciális alakú  $3j$  szimbólum értéke:

$$\begin{pmatrix} j & j & 0 \\ m & -m & 0 \end{pmatrix} = (-1)^{j-m} \frac{1}{\sqrt{2j+1}} \quad (\text{F.16})$$

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ j_1 & -(j_1+m_3) & m_3 \end{pmatrix} = (-1)^{j_3-j_2+m_3} \times \\ \times \left[ \frac{(2j_1)!(-j_1+j_2+j_3)!(j_1+j_2+m_3)!(j_3-m_3)!}{(j_1+j_2+j_3+1)!(j_1-j_2+j_3)!(j_1+j_2-j_3)!(-j_1+j_2-m_3)!(j_3+m_3)!} \right]^{1/2} \quad (\text{F.17})$$

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = (-1)^{J/2} \left[ \frac{(J-2j_1)!(J-2j_2)!(J-2j_3)!}{(J+1)!} \right]^{1/2} \times \\ \times \frac{(J/2)!}{(J/2-j_1)!(J/2-j_2)!(J/2-j_3)!}; \quad J=j_1+j_2+j_3. \quad (\text{F.18})$$

Két fontos összefüggés a forgásmátrixok és  $3j$  szimbólumok kapcsolatából. Két  $j_1, j_2$  forgásmátrix szorzata kifejezhető az eredő  $j$  forgásmátrixok szerint:

$$D_{m_1 m'_1}^{j_1}(\alpha\beta\gamma) D_{m_2 m'_2}^{j_2}(\alpha\beta\gamma) = \sum_{j m m'} (2j+1) \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j \\ m_1 & m_2 & m \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j \\ m'_1 & m'_2 & m' \end{pmatrix} D_{m m'}^{j*}(\alpha\beta\gamma). \quad (\text{F.19})$$

Három  $D$  mátrixszorzatának integrálja:

$$\frac{1}{8\pi^2} \int d\alpha \sin \beta d\beta d\varphi D_{m_1 m'_1}^{j_1}(\alpha\beta\gamma) D_{m_2 m'_2}^{j_2}(\alpha\beta\gamma) D_{m_3 m'_3}^{j_3}(\alpha\beta\gamma) = \\ = \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m'_1 & m'_2 & m'_3 \end{pmatrix}. \quad (\text{F.20})$$

Mivel a  $D_{mm'}(\alpha, \beta, \gamma)$  a  $\gamma$  szögtől  $e^{im'\gamma}$ -n keresztül függ, ezért  $D_{mm'}^j(\alpha, \beta, 0)$ -ra az integrális összefüggések változatlanok maradnak, csak  $\frac{1}{8\pi^2}$  helyett  $\frac{1}{4\pi}$  lesz a normálási faktor.

Az  $\mathbf{e}$  és  $\mathbf{e}'$  egységnyi abszolútértékű vektorok vektorszorzatára érvényes a következő átalakítás:

$$|(\mathbf{e}'^* \times \mathbf{e})|^2 = 1 - |\mathbf{e}' \mathbf{e}|^2. \quad (\text{F.21})$$

Végül itt jegyezzük meg, hogy a 7.§-ban a levezetések során tulajdonképpen a Wigner—Eckart-tétel egy speciális alakját alkalmaztuk, amely azt mondja ki, hogy irreducibilis tenzoroperátorok  $J, M; J', M'$  mátrixelemeinek függése az  $M, M'$  kvantumszámoktól szeparálható és kifejezhető a  $3j$  szimbólumokkal, míg a szeparáció többi tényezője már a mágneses kvantumszámoktól független (ún. redukált mátrixelem).



## IRODALOM

1. Rayleigh, Phil. Mag., 41, 107, 274, 447, 1871.
2. G. Mie, Ann. d. Physik 25, 377, 1908.
3. P. Debye, Ann. d. Physik 30, 57, 1909.
4. C. V. Raman et al., Indian J. of Phys. 2, 387, 1928.
5. H. C. Hulst, Light Scattering by Small Particles, N. Y. Wiley, 1957.
6. M. Born, E. Wolf, Principles of Optics, Pergamon, 1959.
7. G. Herzberg, Molekulaszinképek és molekulaszervezet, Akadémiai, 1956.
8. G. Placzek, E. Teller, Z. Physik 81, 209, 1933.
9. G. Placzek, Marx's Handbuch der Radiologie VI. 2. 205, 1934.
10. L. D. Landau, E. M. Lifsic: Teor. fiz. IV/1, Moszkva, 1968.
11. D. R. Bates et al., Phil. Trans. Roy. Soc. A246. 215, 1953.
12. D. R. Bates, R. H. G. Reid, Adv. Atom and Molec. Phys 4, 13, 1968.
13. T. E. Sharp, Atomic Data 2, 119, 1967.
14. M. Tobin, Laser Raman Spectroscopy, N. Y. Wiley, 1972.
15. M. Born, J. Oppenheimer, Ann. Phys. 84, 457, 1927.
16. S. Cohen, J. R. Hiskes, R. J. Riddell, Phys. Rev. 119, 1025, 1960.
17. G. Hunter et al., J. Chem. Phys. 45, 3806, 1966.
18. L. D. Landau, E. M. Lifsic: Kvantovaja mehanika, Moszkva, 1963.
19. F. Reiche, H. Rademacher, Z. Phys. 39, 444, 1926, 41, 453, 1927.
20. L. Kronig, I. Rabi, Phys. Rev. 29, 262, 1927.
21. E. Wigner, Group Theory, Academic Press N. Y. 1959.
22. A. R. Edmonds, Angular Momentum, Princeton Press, 1957.
23. F. R. Gilmore, J. Quant. Specty 5, 369, 1965.
24. D. Steele et al., Rev. Mod. Phys. 34, 239, 1962.
25. F. V. Bunkin, I. I. Tugov, Phys. Lett. A32, 49, 1970. ZsETF 58, 1987, 1970.
26. H. Bateman, A. Erdélyi, Higher Transcendental Functions, McGraw-Hill, 1953.
27. H. Buchholz, The Confluent Hypergeometric Function, Springer, 1969.
28. A. I. Baz et al., Rasszejanyije stb. Moszkva, 1971.
29. P. M. Morse, H. Feshbach, Methods of Theoretical Physics, McGraw-Hill, 1953.
30. N. J. Bridge et al., Proc. Roy. Soc. A295, 334, 1966.
31. J. Tang, A. C. Albrecht, J. Chem. Phys. 49, 1144, 1968.
32. W. Kolos et al., J. Chem. Phys 46, 1426, 1967.
33. J. M. Schulman et al., Phys. Rev. A5, 1125, 1972.
34. A. Dalgarno, J. T. Lewis, Proc. Roy. Soc. A233, 70, 1955.
35. J. Franck, Trans. Farad. Soc. 21, 536, 1925.  
U. Condon, Phys. Rev. 28, 1182, 1926, 32, 858, 1928.
36. P. P. Shorygin, Zh. Fiz. Khim. 21, 1125, 1947.  
M. W. Wolkenstein, ZsETF, 18, 44, 1948.
37. M. N. Adamov et al., Opt. i Szpektr. 22, 709, 1967.
38. V. A. Davidkin, L. P. Rapoport, Opt. i Szpektr. 35, 377, 1973.
39. V. A. Davidkin, B. A. Zon et al., ZsETF 60, 124, 1971.
40. J. Bergou, I. I. Tugov, Abstract of Conf. Papers VII. Vseszozjuzn. Konf. po Nelin. Opt., Taskent, 1974.
41. D. R. Bates, J. Chem Phys. 19, 1122, 1951.
42. F. V. Bunkin, I. I. Tugov, Phys. Rev. A8, 601, 1973.
43. M. E. Rose, Elementary Theory of Angular Momentum, Wiley, 1957.



# NAGYTISZTASÁGÚ ALKALIHALOGENID EGYKRISTÁLYOK ELŐÁLLÍTÁSA ÉS TULAJDONSÁGAI\*

TARJÁN IMRE

SOTE Biofizikai Intézet, Budapest

Az alkalihalogenid kristályok több mint fél évszázada jó modellanyagok, előbb az ideális, majd a reális kristályok megismerése területén. Főként az elvi kérdések tisztázása, de a közvetlen gyakorlati felhasználásuk is érdekessé teszi vizsgálatukat.

Kb. 10 évvel ezelőtt új periódus kezdődött az alkalihalogenidek területén, amely a nagytisztaságú kristályok előállításával függ össze. Régebben az volt a vélemény, hogy olvadékból viszonylag egyszerűn növeszthetők tiszta egykristályok. Részben ezért tartoztak az alkalihalogenidek a kedvelt kutatási anyagok közé. Az ellentmondó és reprodukálhatatlan megfigyelések gyarapodása — főként a színcentrumok területén — egyre kétségesebbé tették e vélemény helyességét. Ma már tudjuk, hogy számos megállapítás vitatható és sok kísérletet meg kell ismételni.

Nagytisztaságú alkalihalogenid kristályok előállítására vonatkozó vizsgálatokkal számos intézet, ill. laboratórium foglalkozott és foglalkozik napjainkban is, pl. a göttingeni, frankfurti, groningeni, kyoikui, nagoyai, utahi egyetemeken, az argonnei laboratóriumban, a Csehszlovák Tudományos Akadémia Szilárdtestkutató Intézetében.

A következőkben áttekintést adok az eredményekről és pedig azokra a tapasztalatokra építve, amelyeket az *MTA Kristályfizikai Tanszéki Kutató Csoportjában* (Semmelweis OTE Biofizikai Intézete) értünk el.

Beszámolóm három részből áll. Az első részben a tisztítás és növesztés, a másodikban a szennyezés-ellenőrzés módszereivel foglalkozom. A harmadik részben pedig főleg a színcentrum-vizsgálataink köréből megemlítek néhány olyan eredményt, amelyet nagytisztaságú kristályokon nyertünk, ill. amely elérésében a kristályok tisztasága alapvető szerepet játszott.

## 1. Tisztítási eljárások

Az általunk preferált tisztítási módszerek az 1. ábrán, pontosabban annak jobb oldalán láthatók. A bal oldalon a fontosabb szennyezések szerepelnek. Az elvi és gyakorlati szempontból egyaránt jelentős eljárásokat a vastag vonal, a gyakorlati szempontból kevésbé jelentőseket a közepes vastagságú vonalak jelzik. Harmad-sorban jönnek szóba a vékony vonalakkal jelölt módszerek. Leghatásosabb módszer a zónázás, de általában önmagában nem elégséges. Széles spektrumú eljárás a desztillálás is, de körülményes és hosszadalmas.

\* A "Vereinigung für Kristallographie in der Gesellschaft für Geologische Wissenschaften der DDR" 1975. decemberében rendezett konferenciáján felkérésre tartott előadás.



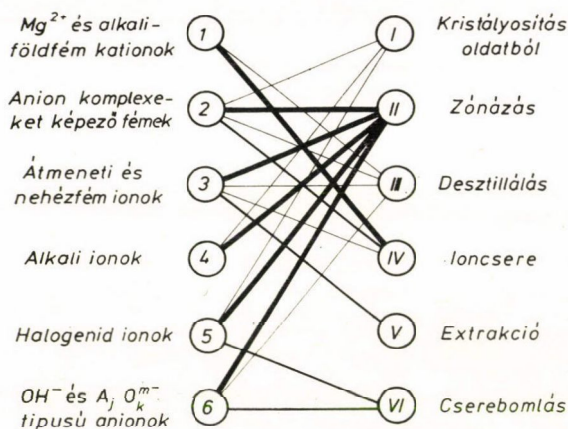
Tapasztalatunk szerint *kloridok, bromidok és jodidok* általános tisztításával kapcsolatban sorjában a következő lépések javasolhatók:

1. *Ioncsere:*

a) Anionok, pontosabban anionkomplexet alkotó fémek eltávolítására a közepesen bázisos (pl. Dowex 2), átmeneti- és nehézfémet kationok eltávolítására az erősen savas (pl. Dowex 50 vagy Varion KS) gyantákat használjuk.

b) Célszerű további ioncserét is elvégezni. A kelátképző csoportokat tartalmazó gyanta (pl. Dowex A—1) képes a magnézium és az alkáli földfém ionokat még tömény alkalihalogenid oldatból is kivonni. A kivonás hatásossága az oldat pH-értékével nő.

SZENNYEZÉSEK ÉS TISZTÍTÁSI  
MÓDSZEREK



1. ábra. Szennyezések és tisztítási módszerek alkalihalogenidek esetében

2. *Vizes oldatból való kristályosítás* elsősorban az alkáliion és a halogénion szennyezések eltávolítása szempontjából lényeges.

3. Következő lépésként a *szénhalogenidekkel való kezelést* javasoljuk, amelyet a táblázatban a cserebomlás elnevezésű csoportba soroltunk. A kezelés lényege abban áll, hogy kloridok esetében széntetraklorid ( $\text{CCl}_4$ ), bromidok és jodidok esetében pedig bromoform ( $\text{CHBr}_3$ ), ill. metiljodid ( $\text{CH}_3\text{I}$ ) gőzöket buborékoltatunk át a tisztítandó alkalihalogenid oldadékán. Ezáltal az oldadék hőmérsékletén illékony savakat, ill. savanhidrideket képező anionok ( $\text{OH}^-$ ,  $\text{O}_2^-$ ,  $\text{SO}_4^{2-}$ ,  $\text{CO}_3^{2-}$ ,  $\text{NO}_3^-$  stb.) koncentrációja csökkenthető az oldadékban, és pedig főként illékonyaságuk mértékében. A módszer alkalmas tehát a karbonáttá, cianidá, szulfidá elbomló szerves szennyezések eltávolítására is.

4. Befejezésül javasoljuk a tisztítás szempontjából széles spektrumú *zónás olvasztás* alkalmazását. Ennek a módszernek a feladata elsősorban a nehezen illó savakat, ill. savanhidrideket képező anionok eltávolítása, de a zónázás szerepet játszik más szennyezések (pl. szén, alkáli és halogén szennyezések) eltávolításában is.

A fentieket néhány megjegyzéssel egészítem ki.



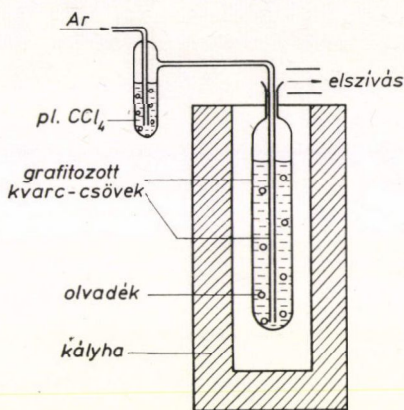
a) Megvizsgáltuk, hogy milyen szerepet játszanak a tisztítási műveletek során felhasznált *edények*, mennyiben szennyez a víz és a *környező gázok*. A vizsgálatokat NaCl esetében végeztük el, éspedig az alkáli földfémekre és a magnéziumra vonatkozólag. Ez azért látszott érdekesnek, mert a II. oszlopbeli fémek az alkalihalogenidek állandó kísérői, és éppen NaCl esetében makacs szennyeződésnek bizonyult a  $\text{Ca}^{++}$ -ion, amennyiben zónázással nem távolítható el. (Az olvadék és a kristály közötti eloszlási tényező ugyanis közel 1. Hasonló a helyzet egyébként NaBr-nál is.)

Vizes oldatok esetében célszerű *teflon* vagy *polietilén* edényzetet használni, amely néhány óra alatt szobahőmérsékleten a tömény oldat kezdeti  $10^{-7}$  mol/mol szennyezettség-koncentrációját nem növeli. Az általunk vizsgált valamennyi üveg és kvarc-fajta viszont a szennyezettség-koncentrációt legalább megkétszerezi.

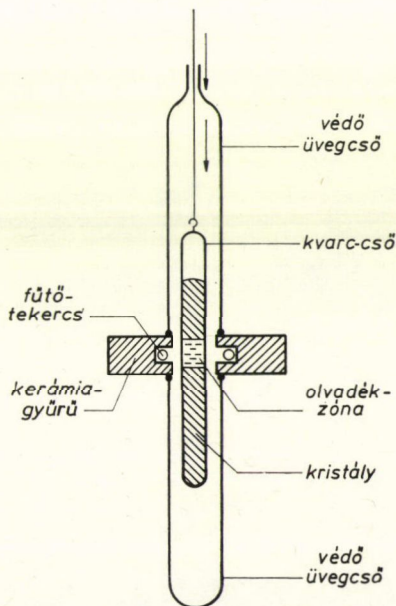
Odószerként elegendő kvarcból készült desztilláló készülékben kétszer desztillált vizet használni, ha nem kívánunk  $10^{-7}$  mol/mol-nál kisebb szennyezettség-koncentrációt elérni. Nagyobb igények esetén ajánlatos a vizet desztillálás után teflonedényben ioncserével (Dowex A—1) tisztítani.

Az olvadékoknak szénhalogenidekkel való kezelését, majd az olvadékok zónázását, valamint az egykristállyá való növesztését *kvarccsőben* végeztük, éspedig mindegyik műveletet *ugyanabban a csőben* hajtottuk végre. A cső belső falát még a tisztítandó anyag bevétele előtt vékony grafitréteggel vontuk be. E célból a csővön kb.  $1000^\circ\text{C}$ -on átáramoltattuk a megfelelő szénhalogenid gőzét. A grafitbevonat a szénhalogenid elbomlása révén alakul ki. Ezután kerül sor az olvadék kezelésére (2. ábra), miközben a nem kívánatos anionok a gazdarács halogenidjeire cserélődnek ki. — A folyamat közben, amint az olvadék tisztul, felülete felülről nézve domborúvá válik. Ez azt jelenti, hogy az olvadék ebben az állapotban már nem tapad a kvarchoz, ami kedvező körülményt biztosít a további eljárás számára.

A 3. ábra már a zónázást szemlélteti. Egy vertikális zónázókészülék vázlatát láthatjuk. A grafit, amely az eljárás elején a kvarccső belső falát borítja, belekerül ugyan az olvadékba, de végső soron zavart nem okoz, mert zónázáskor a zónázott anyag tetején összegyűlik. A grafitozás jelentősége abban áll, hogy megakadályozza az olva-



2. ábra. Az olvadék kezelése szénhalogeniddel NaCl esetében



3. ábra. Alkalihalogenidek függőleges zónázása



déknak a kvarccal való érintkezését a tisztítás kezdeti szakaszában, amikor az olvadék még nedvesíti a kvarcot. Később, amikor a grafit levált a kvarccsőről, a kvarc nem tapadó olvadékkal érintkezik, amely kevésbé vesz fel szennyezést a kvarcból. Célszerű különlegesen tiszta szintetikus kvarcból (pl. Ultrasil) készült csöveket használni. (A zónázást kb. hússzor végeztük el, majd — mint említettem — ugyanabban a csőben megnövesztettük az egykristályt. Zónázáskor kb. 6 cm/óra, növesztéskor kb. 6 mm/óra sebességet alkalmaztunk.)

A kvarccső leforrasztása előtt az olvadék argonnal és szénhalogenid gőzzel érintkezik. Ezek a gázok, ill. gőzök, hacsak nem vetjük alá őket különleges tisztításnak, a II. oszlopbeli fémszennyezések koncentrációját néhány óra alatt  $10^{-7}$  mól/mol nagyságrendben növelik.

b) Az előzőekben említettem, hogy NaCl és NaBr esetében különös figyelmet kell fordítani a kalcium-szennyezés eltávolítására. Erre a célra egy *koprecipitációs eljárást* is igen hatásosnak találtunk. A NaCl oldathoz  $10^{-3}$  mol/mol koncentrációban báriumkloridot, majd  $10^{-2}$  mol/mol koncentrációban nátriumkarbonátot is adtunk. A  $Ba^{++}$ -ionok báriumkarbonát formájában kicsapódtak és velük együtt a  $Ca^{++}$ -ionok zöme is kicsapódott. Az oldatban  $Ca^{++}$ -ionok helyett nagyobbára  $Ba^{++}$ -ionok fordulnak elő, ezek azonban zónázással eltávolíthatók, minthogy bárium esetében az eloszlási koefficiens 0,6.

c) A *vákuum-desztillálás* módszerét nem elvi okok folytán említtem utoljára, hanem azért, mert gazdaságtalan és nehézkes. Egy megjegyzést azonban szeretnék tenni ezzel a módszerrel kapcsolatban is. A  $Ca^{++}$ -ionokra vonatkozó eloszlási koefficiens NaCl esetében kedvezően befolyásolható, ha az olvadékhoz nátriumkarbonátot adunk. Az olvadékban kalciumkarbonát és kalciumoxid képződik, amelyek vissza is maradnak az olvadékban. A nátriumkarbonát-adalék növelésével az eloszlási koefficiens javítható: pl. 0,1 % nátriumkarbonát esetében az eloszlási koefficiens 0,08, 1 % esetében pedig 0,01.

*Fluoridok* tisztításával kapcsolatban is az előzőekben ismertetett módszerek szolgálnak alapul. Érdemes azonban néhány momentumot kihangsúlyozni és rámutatni az előzőekkel szemben jelentkező eltérésekre. Ezideig főként nátriumfluoriddal foglalkoztunk, ezért a megjegyzések is elsősorban erre vonatkoznak.

a) A fluoridoknál különös gondot kell fordítani a fémionokat tartalmazó anionkomplexek eltávolítására. A fluoridion ui. sokféle kationnal képezhet különböző stabilitású anionkomplexeket.

b) Az  $OH^-$ -ionok eltávolítása céljából a NaF vizes oldatát hidrogénfluoriddal addig kezeltük, míg az oldatból pH-értéke 0,3-ról 7 alá csökkent. A kissé savanyú oldatból  $OH^-$ -ionoktól mentes kristályokat nyertünk és ezeket vetettük azután alá zónatisztításnak.

c) A zónázást és az egykristállyá való növesztést üveggrafitból való edényben végeztük, inert atmoszférában. A grafit használata teszi érthetővé, hogy NaF esetén megelégedhetünk az  $OH^-$ -ionoknak a fent vázolt módon történő eltávolításával. Tapasztalatunk szerint egyébként zónázáskor a kristály az  $OH^-$ -ionoktól is tisztul.

d) A LiF vízben kevésbé oldódik, ezért az oldatos tisztításokat litiumacetát és ammoniumfluorid oldatain végeztük el, vagyis azokat az anyagokat tisztítottuk, amelyekből a litiumfluoridot előállítottuk.



Az előzőkben vázolt eljárásoknak az említett sorrendben való elvégzése olyan egykristályok előállítását teszi lehetővé, amelyek szennyezettsége kisebb  $10^{-7}$  mol/mol-nál.

A tisztítási módszerekkel kapcsolatban további részletek találhatók az [1—4] dolgozatokban.

## 2. Analitikai módszerek a tisztaság ellenőrzésére

A következőkben néhány megjegyzést fűzök az általunk alkalmazott módszerekhez [1—4].

1. *Kémiai módszerek.* A szokásos kémiai analitikai módszerek nagy többsége a jelen esetben hatástalan, hiszen tömény alkalihalogenid oldatokban kell kimutatni a viszonylag kis mennyiségben jelenlevő szennyezéseket. A nagy ionerősség ui. a kémiai egyensúlyokat nagy mértékben és analitikai szempontból rendszerint kedvezőtlenül befolyásolja.

•Az egyes szennyező ionokkal kapcsolatban koncentrációjuktól függően több módszert is kidolgoztunk, amelyek nemcsak a végállapotban, hanem a tisztítás egyes fázisaiban is lehetővé teszik az ellenőrzést. A követelmények a két esetben nem teljesen azonosak. Menet közben az ellenőrzés *gyors végrehajtásán*, később az érzékenységen van a hangsúly. Az előbbi követelménnyel kapcsolatban sikerült megfelelő mérési módszereket kidolgoznunk, a másik vonatkozásban pedig a dúsítás kellett megoldani. Ha ui. megtörtént a kellő dúsítás, a mérés már konvencionális kémiai analitikai eljárásokkal elvégezhető.

Eljárásaink a kationok és anionok széles csoportját fedlelik. Megoldásokat találunk a kationok közül pl. az ólom, réz, alumínium, nikkal, vas, valamint az alkáli földfém szennyezésekre, nincs megoldva viszont az ellenőrzés a mangánra és krómra, továbbá a ritka földfémekre vonatkozólag. Az anionok közül megoldottnak tekinthető az  $\text{OH}^-$ -ionok, a foszfát és szilikát szennyezések mérése, megoldatlan a szulfátoké és nitrátoké.

A tisztítás közben alkalmazott, *kevésbé érzékeny módszerekkel*  $10^{-7}$ — $10^{-6}$  mol/mol *koncentrációig, dúsítással kombinált módszerekkel* pedig  $10^{-8}$  mol/mol *koncentrációig megbízható módon alkalmazhatók kémiai módszereink.*

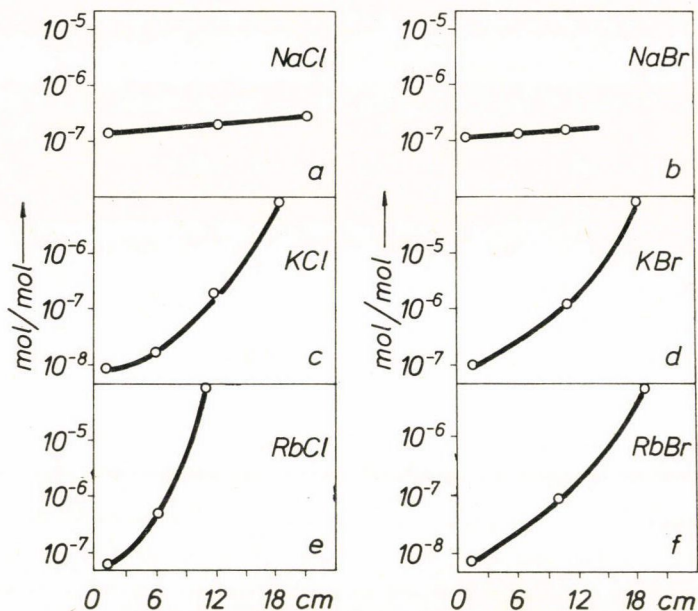
2. *Az ionszelektív elektrokémiai módszert* használtuk hazai kidolgozású elektródokkal fluoridokban a halogén szennyezések kimutatására [5—6]. Léteznek azonban szulfid-, cianid- és tiocianát-ionok méréseire alkalmas elektródok is. Jelen formájában *a módszer mérési határa ionfajtától függően:*  $10^{-5}$ — $10^{-8}$  mol/mol.

3. *Az ionvezetőképesség mérése* olyan ionos szennyezések kimutatására szolgál, amelyek töltése eltér a gazdarácsot alkotó ionok töltésétől. Az ilyen ionok beépülése vakanciák képződésével jár, aminek következtében megnő a kristály elektromos vezetőképessége. A vakanciák egy része a szennyezésekhez asszociálva, a többi disszociáltan helyezkedik el a rácsban. A vezetésben ez utóbbiak vesznek részt. Egy bizonyos hőmérséklet felett (amelyet termodinamikai modellel elméletileg is meghatároztunk [7—8]) valamennyi vakancia disszociált állapotban fordul elő, és ekkor a vezetőképesség növekedése arányosnak vehető a szennyezés koncentrációjával. Kloridok, bromidok esetében megfelelő hőmérséklet pl.  $393^\circ\text{C}$ .

A 4. ábra az ionvezetőképesség alapján mért szennyezéskonzentráció eloszlását mutatja zónázott kristályrudak hossza mentén. Látható, hogy a zóna vándorlási



irányába, vagyis a rúd alsó végétől a tetejéig haladva, a szennyezés a várakozásnak megfelelően nő. NaCl és NaBr esetében a II. oszlopbeli fémionok koncentrációja a rúd hossza mentén alig változik, ami összefügg azzal az említett körülménnyel, hogy ezek a kristályok a kalciumionoktól zónázással nem tisztíthatók.



4. ábra. Szennyezés-eloszlás zónázott alkalihalogenid kristályrudak hossza mentén

Az ionvezetés mérése *igen érzékeny módszer*: az eltérő töltésű ionos szennyezésekre vonatkozólag  $10^{-8}$  mol/mol-nál kisebb koncentráció is jól mérhető.

A módszert alkáli földfém szennyezések esetében összevetettük kémiai módszerekkel és  $10^{-8}$  mol/mol-nál nagyobb koncentrációknál a két módszer között egyezést találtunk. Ez a tény jogosított fel bennünket arra, hogy kisebb koncentrációknál is támaszkodjunk az ionvezetőképesség mérésére.

Hangsúlyozni kell azonban, hogy az ionvezetés-mérésből levont következtetésekkel kapcsolatban óvatosaknak kell lenni. A módszer csak akkor megbízható, ha a szennyező kationok mellett a szennyező anionok elhanyagolható mennyiségben vannak jelen. Bizonyos kationok és anionok (pl.  $\text{OH}^-$  és  $\text{Ca}^{++}$ ) ui. kölcsönhatásba léphetnek egymással és ezáltal megváltozik a szabad vakanciák száma, következésképp a vezetőképesség is. Ilyen körülmények között a vezetőképesség nem tükrözi helyesen a szennyezettség mértékét. Előfordulhat, hogy erősen szennyezett kristály kis vezetőképességgel rendelkezik, azaz tisztának mutatkozik.

4. *UV abszorpciós spektrofotometria.* A szennyezések elektronátmenettel összefüggő abszorpciós sávjait vizsgáltuk, amelyek alkalihalogenidek esetében az UV (egyes esetekben a vákuum UV) tartományba esnek. A tisztítási módszereket feltüntető táblázatban a felsorolt szennyezések közül nem tanulmányozhatók ilyen módon az alkálifémek, valamint a magnézium és az alkáli földfémek ionjai. Ezek abszorpciós sávjait ui. elfedik a gazdarács sávjai. Egyes szerzők néhány UV abszorpció



ciós sávot ilyen szennyezésekhez rendelnek (pl. LiF-ban  $Mg^{2+}$ ), ez az asszignáció azonban véleményünk szerint vitatható (pl. a sáv asszociátumoktól származik).

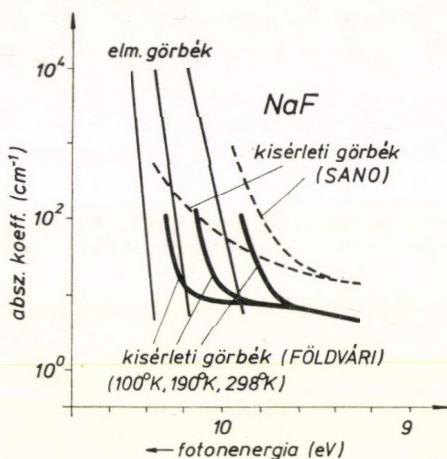
Az egyes módszerek érzékenységét az általuk kimutatható legkisebb szennyezéskonzentrációval jellemezzük. Ez az adat az abszorpciós spektrofotometria esetében — ha a vizsgált sáv tisztán (háttér nélkül) jelentkezik, nagyságrendben:  $10^{-7}$ — $10^{-6}$  mol/mol. A kedvezőbb érték akkor áll fenn, ha az oszcillátorerősség közel 1.

Gyakori eset, hogy a szennyezésektől származó sávok a gazdarács szélső excitonsávjának hosszúhullámú lejtője alatt helyezkednek el, és létezésüket az alacsony hőmérsékleteken felvett spektrumok alapján is csak gyanítani lehet. Ilyenkor a spektrumokat az Urbach-szabály alapján elemeztük. Az 5. ábra jól mutatja NaF kristályaink viszonylag nagy tisztaságát [9].

Az analitikai munkát megkönnyíti, ha elméleti megfontolások alapján előre jelezhető egy sáv megjelenésének helye. Ezideig azonban a fordított munkamenet valósult meg. Főként az átmeneti- és nehézfém szennyezők elektronátmeneteivel kapcsolatban végeztek kvantumkémiai számításokat, kísérletileg már ismert sávokra vonatkozólag.

5. A fotó-, röntgen- és termolumineszcencia egyaránt felhasználható szennyezések kimutatására. E módszerek főként akkor előnyösek, ha a különböző szennyezések abszorpciós sávjai közel azonos helyeken fekszenek, vagy ha az abszorpció mérhetetlenül kicsiny, viszont jól mérhető a lumineszcencia-emisszió. A lumineszcens módszerek egyes esetekben egy-két nagyságrenddel érzékenyebbek az abszorpciós spektrofotometriánál.

6. A paramágneses rezonanciaspektroszkópia — mint az elnevezése is jelzi — a paramágneses módon, vagyis párosítatlan spinnel beépülő idegen atomok, atomcsoportok, atom- és molekulaionok kimutatását teszi lehetővé. Pl. sok átmeneti- és nehézfém ion szennyeződés jól értékelhető jelet ad, nem adnak jelet viszont a halogénionok, de kimutatható némely halogén molekulaion. A kétértékű alkáli földfém ionok és a  $Mg^{++}$  sem észlelhető paramágneses módon. A módszer érzékenységéről a következőket mondhatjuk. Az általában használt spektrométerek érzékenysége  $10^{11}$  spin/Oe. Ez azt jelenti, hogy ha a vizsgált atom vagy ion egyetlen (kb. 1 Oe félszélességű) jelet szolgáltat, akkor a minta kb.  $10^{11}$  spin-t tartalmaz, ami már mérhető. Ez azt jelenti, hogy alkalihalogenidek esetében  $10^{-11}$  mol/mol szennyezés már kimutatható. Az érzékenység a jelek számától és intenzitáviszonyaitól függően csökken. A módszer a szennyezések beépülésének módjára is felvilágosítást nyújt. Eldönthető pl., hogy semleges vagy ionos formában, egy- vagy többértékű ion alakjában történt-e a beépülés, jelen vannak-e dimerek, trimerek vagy precipitátumok, van-e a környezetben vakancia, milyenek a szimmetriaviszonyok.



5. ábra. NaF abszorpciós szinképe a vákuum ultraibolyatartományban, féllogaritmikus koordináta-rendszerben. A szaggatott vonalak *R. Sano*, a folyamatos vastag vonalak *Földvári I.* méréseit, a vékony folyamatos vonalak pedig az Urbach-szabály alapján végzett számítások eredményeit jelzik

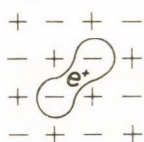


### 3. Extrém tiszta alapanyagú kristályokon nyert néhány eredmény

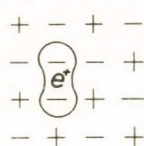
1. A régebbi irodalmi adatok szerint a  $Mg^{++}$ -ion beépülése KCl kristályokba ezek növesztésekor új abszorpciós sávot eredményez az UV-ban [10]. Tiszta alapanyagú kristályokon ilyesmit nem figyeltünk meg. Új sáv mutatkozik viszont a  $KCl(Mg)$  és  $NaCl(Mg)$  rendszereken, ha a kristályokat elektrolitikusan színezzük, majd az F-centrumokat ellentétes elektromos tér segítségével a kristályból „kihúzzuk” (vákuumban kb.  $580^\circ C$ -on) [11]. Vizsgálataink szerint e sávokat vakanciapárban elhelyezkedő neutrális Mg-atom hozza létre. — Hasonló centrumokat Ca, Sr, Ba esetében nem tapasztaltunk. Ez utóbbi atomok a NaCl, ill. a KCl rácsban könnyebben adják le elektronjaikat, mint a Mg, és ezért csak kétszeresen ionizált formában fordulnak elő.

2. Alkali földfémekkel szennyezett KCl kristályokon Hayes és Nichols megfigyelték, hogy megfelelő hőmérsékleten történő röntgenezéskor az  $\langle 110 \rangle$  irányított-ságú  $V_K$ -centrumok helyett  $\langle 100 \rangle$  irányított-ságú  $V_K$ -centrumok jelennek meg (6. ábra) [12]. A NaCl esetében azonban nem találták meg ezeket a centrumokat. Vizsgálataink szerint viszont az igen tiszta alapanyagú és kalciummal

$V_K \langle 110 \rangle$



$V_K \langle 100 \rangle$



6. ábra.  $V_K \langle 100 \rangle$   
és  $V_K \langle 110 \rangle$   
modellje

adalékolt NaCl kristályokon ugyancsak megfigyelhetők az  $\langle 100 \rangle$  orientációjú  $V_K$ -centrumok [13]. Hasonló centrumok hozhatók létre NaF (Ca), vagy NaF (Cd) rendszerekben, ha megfelelő tisztaságú alapanyagból indulunk ki [14]. A színeződéssel kapcsolatos Crawford-féle elképzelés éppen az  $\langle 100 \rangle$  orientációjú  $V_K$ -centrumok kialakulására épít [15]. Az előbbieken alapján úgy véljük, hogy ez a mechanizmus a színcentrumok képződésével kapcsolatban általánosan elfogadható folyamat, amely azonban csak akkor „működhet”, ha a kristály eléggé tiszta, ill. elég kevés benne az  $OH^-$  szennyeződés.

3. A tiszta kristályokon végzett vizsgálatok alapján megnyugató kép alakult ki a szobahőmérsékleten röntgen- vagy  $\gamma$ -sugárzással végzett színezés mechanizmusáról is. A probléma abból adódott, hogy magasabb hőmérsékleten a színeződési folyamatok szennyezésfüggők. A jelenlegi elképzelés összhangban van az alacsony hőmérsékletű színezés tapasztalataival. A folyamatok azonos módon indulnak el alacsony és magasabb hőmérsékleteken, de míg elég alacsony hőmérsékleten már a primer lépések rögzülnek, addig magasabb hőmérsékleten a folyamatlánc későbbi állapota stabilizálódik. A lényeges az, hogy az egész képsor nagy vonásokban értelmesen összeállt.

Ezek után a szobahőmérsékleten felvett színeződési görbék is egyszerűen és kvantitatíve értelmezhetők. Extrém kis szennyezés-koncentráció esetén az F-sáv növekedése a sugárdózis függvényében egy exponenciális és egy lineáris taggal jó közelítéssel leírható [16]. Az exponenciális tag a kristályban eleve jelenlevő anion- és kationvakanciák (vakanciapárok) „elfogyasztásával” függ össze, a lineáris tag pedig a sugárzás hatására keletkező Frenkel-párokkal kapcsolatos. — Kétértékű fémszennyezések jelenlétében a színezési görbe eltér a tiszta kristályétól, de ez is jól leírható, ha az előbbi két taghoz egy másik exponenciális tagot is felvesszünk [17].

Az új tag a sugárzás által keltett Frenkel-párok stabilizálásának olyan módjával kapcsolatos, amelyben a szennyezés által „behozott” kationvakanciák helyére klór atomok kerülnek. A második exponenciális lassabban cseng le, mint az első, ami



azzal magyarázható, hogy az utóbbi folyamat valószínűsége kisebb, mint az eleve jelenlevő vakanciapárok felhasználásával kapcsolatos folyamaté.

4. Az ionkristályok plasztikus deformációját kísérő elektromos jelenségek vonatkozásában az utóbbi évtizedekben sok, egymásnak ellentmondó híradás, ill. elgondolás látott napvilágot. Utóbb kiderült, hogy ezek nagyrészt a kristálypéldányok ismeretlen szennyezettségére vezethetők vissza. Kiss et al. szisztematikus vizsgálatokat végzett az általunk előállított nagytisztaságú és ismert kalcium, ill. stroncium tartalmú NaCl kristályokon, és sikerült egyes kérdésekben egyértelmű megállapításokra jutnia [18—20]. Ilyenek pl.:

a) A kristályok deformálásakor elmozduló diszlokációk által felvett elektromos töltés (Sztjepanov-effektus) nő a kationvakancia-koncentrációval, amit pl. a kalcium-tartalom változtatásával érhetünk el. E szerint tehát a régebbi feltevések közül az nyert alátámasztást, amely szerint a diszlokációk elmozdulásakor negatív töltésre tesznek szert.

b) Ugyancsak a kontrollált szennyezéstartalmú kristályok tették lehetővé, hogy összefüggéshez jussunk a kristályok keménysége és az adalékanyagként szolgáló kétértékű fémek koncentrációja, ill. beépülésük módja között. A vizsgálatok alapján a II. oszlopbeli fémszennyezésekkel kapcsolatos keménységváltozás három komponensre bontható, éspedig a szeparáltan elhelyezkedő fémionokra, valamint az aggregátumokat tartalmazó dipóloktól, továbbá a diszlokációkon levő töltésektől származó járulékokra. A komponensek nagyságából a hibák közötti kölcsönhatásokra lehet következtetni és információkat kapunk a hőkezeléseknél végbemenő folyamatokra vonatkozólag is.

5. A színcentrumokat tartalmazó kristályok többféle módon is felhasználhatók optikai információ-tárolásra. Voszka R. extrém tiszta NaCl kristályokon információ beírásra az F-centrumoknak X-centrumokká való átalakulását használta fel. Az eljárás előnye, hogy az F- és X-sávok elég távol fekszenek egymástól: az előbbi maximuma a kékbe, az utóbbié a sárgába esik.

#### IRODALOM

1. R. Voszka, I. Tarján, L. Berkes, J. Krajsovsky, Kristall und Technik 1, 423—430, 1966.
2. K. Raksányi, R. Voszka, Kristall und Technik 4, 227—236, 1969.
3. R. Voszka, K. Raksányi, L. Berkes, Kristall und Technik 5, 409—412, 1970.
4. R. Voszka, K. Raksányi, I. Földvári, Kristall und Technik 8, 1347—1356, 1973.
5. I. Földvári, R. Voszka, phys. stat. sol. (a) 28, 249—253, 1975.
6. I. Földvári, R. Voszka, phys. stat. sol. (a) 31, 765—770, 1975.
7. A. Mecseki, Acta Phys. Acad. Sci. Hung. 33, 291, 1973.
8. A. Mecseki, R. Voszka, L. Berkes, I. Földvári, Acta Techn. Acad. Sci. Hung. 80, 69—82, 1975.
9. I. Földvári, R. Voszka, K. Raksányi, phys. stat. sol. (a) 26, K83—85, 1974.
10. G. D. Sootha, D. Singh, Phys. Rev. 183, 842—845, 1969.
11. R. Voszka, A. Watterich, phys. stat. sol. (b) 55, 787—792, 1973.
12. W. Hayes, G. M. Nichols, Phys. Rev. 117, 993—998, 1960.
13. A. Watterich, M. Gécs, R. Voszka, phys. stat. sol. 31, 571—577, 1969.
14. Yu. S. Gromovoi, V. G. Grachev, V. V. Teslenki, G. Corradi, Fiz. Tverd. Tela 16, 1806, 1974.
15. J. H. Crawford, G. M. Nelson, Phys. Rev. Letters, 5, 314—315, 1960.
16. G. Corradi, I. M. Gomaa, R. Voszka, phys. stat. sol. (a) 8, K81—83, 1971.
17. G. Corradi, R. Voszka, I. M. Gomaa, Acta Phys. Hung. 38, 243—252, 1975.
18. J. Kiss, J. Sárközy, Krisztallográfia 16, 955—960, 1971.
19. A. Tóth, J. Kiss, phys. stat. sol. (a) 19, K61—64, 1973.
20. A. Tóth, J. Sárközy, phys. stat. sol. (a) 28, K93—96, 1975.







# KRITIKUS JELENSÉGEK ÉS A MULTIPLIKATÍV RENORMALIZÁCIÓS CSOPORT\*

FORGÁCS GÁBOR

MTA Központi Fizikai Intézete, Budapest

## TARTALOM

Bevezetés .....	51
1.1. A Wilson-féle renormalizációs csoport .....	54
1.2. A Gell—Mann- és Low-féle multiplikatív renormalizációs csoport .....	58
1.3. A Callan—Symanzik-egyenlet .....	64
2.1. A Wilson—Kadanoff-féle hosszskalázás és a Gell—Mann- és Low-féle renormalizációs csoport. Az új modell .....	67
2.2. A fix pont csatolási állandó .....	71
2.3. Az $\eta$ kritikus index meghatározása .....	72
2.4. A $\nu$ kritikus index meghatározása .....	73
2.5. Anomális dimenzió és a Gell—Mann- és Low-féle renormalizációs csoport .....	76
2.6. Az $\alpha$ kritikus index meghatározása .....	79
2.7. Korrekciók a skálátörvényekhez .....	81
Összefoglalás .....	82
A. függelék .....	83
B. függelék .....	89
C. függelék .....	91
D. függelék .....	92
Irodalom .....	93

## Bevezetés

Miért van az, hogy bizonyos hőmérséklet alatt a folyékony víz „eltűnik” és helyette valami szilárd, jégnek nevezett anyag jelenik meg — tették fel valamikor régen a kérdést az emberek. Talán ezzel a kérdéssel vette kezdetét a fizika egyik legérdekesebb és legizgalmasabb területének, a fázisátalakulások jelenségének vizsgálata. Először fázisátalakulásokon olyan folyamatokat értettek, amikor az eltűnt és kialakult fázis szemmel láthatóan különbözött egymástól. Erre példa a víz jéggé fagyása vagy elpárolgása. Később a fenti fogalmat olyan átalakulásokra is kiterjesztették, amikor szabad szemmel a két fázis között már semmiféle különbséget nem lehetett észrevenni. Ilyen például a paramágneses-ferromágneses átmenet mágneses anyagokban, vagy a strukturális átalakulások kristályokban ( $\alpha$ — $\beta$  vasátmenet). Érezhető, hogy míg a második esetben a rendszer folytonosan változik, addig az első esetben a jelenség ugrásszerűen megy végbe. Azonban, ha a víz nyomását és hőmérsékletét alkalmasan választjuk meg, akkor kiderül, hogy a folyékony halmazállapotú fázis folytonosan is átmehet a gázfázisba. Azt a pontot, ahol a fenti értelemben vett

\* Egyetemi doktori értekezés, megvédve 1975-ben.



folytonos fázisátalakulás végbemegy, kritikus pontnak, vagy másodrendű fázisátalakulás pontjának, míg az ugrásszerű átalakulások hőmérsékletét az elsőrendű fázisátalakulás pontjának nevezzük.

(Az elsőrendű, illetve másodrendű kifejezés azzal kapcsolatos, hogy az első esetben a szabadenergiának, mint termodinamikai függvénynek az első deriváltjai, míg a második esetben második deriváltjai nem folytonosak.)

A kritikus pontban számos fizikai mennyiség végtelenné válik. Annak leírására, hogy a fizikai mennyiségek hogyan válnak végtelenné, bevezették a kritikus indexek fogalmát. Általában feltételezik, hogy a szinguláris viselkedés  $(T - T_C)^{-\lambda}$  alakban írható fel, ahol  $\lambda$  pozitív szám. A kritikus pont körül végbemenő folyamatokat leíró elméletek egyik fő célja a kritikus indexek értékének meghatározása.

Fázisátalakulások, illetve fázisátalakulásszerű jelenségek rendkívül sokféle rendszerben végbemehetnek (fizikai, kémiai, biológiai stb.), ezért e jelenségek minél pontosabb megértése a különböző területeken tevékenykedő kutatók közös célja.

Jelen dolgozatban vizsgálatainkat a másodrendű fázisátalakulásokra, vagy más néven a kritikus jelenségekre fogjuk korlátozni. Másodrendű fázisátalakulásokra példák a már említett víz-gőz átalakulás a kritikus ponton és a ferromágneses-paramágneses átalakulás, továbbá a szupravezetés és szuperfolyékonyság kialakulása, Bose—Einstein-kondenzáció stb. E jelenségek elméleti vizsgálata rendkívül bonyolult. A kritikus pont közelében a más területeken oly sikeresen alkalmazható eljárások (Hartree—Fock-közelítés, különböző sorfejtések), a rendszerben végbemenő drasztikus változások, a figyelembeveendő szabadsági fokok nagy száma miatt mind csöndöt mondanak.

Elméleti vonatkozásban az első sikert tulajdonképpen a két-dimenziós Ising-modell Onsager-féle megoldása jelentette 1944-ben [1]. Ez volt az első, teljes matematikai precizitással végigkövethető, nem-triviális példa, melyben folytonos fázisátalakulás volt kimutatható. A modell inkább matematikai és általános következtetések levonása szempontjából volt rendkívül fontos, mintsem fizikai szempontból, mivel a természetben ilyen modellel leírható rendszer nemigen található; a háromdimenziós Ising-modell, mely már fizikai szempontból is rendkívül jelentős lenne, egzaktul mindeztideig nem sikerült megoldani.

A továbbiakban a kritikus ponton, vagy annak közelében végbemenő folyamatoknak, vagyis a kritikus jelenségeknek a leírásához az úgynevezett rendparaméter [2] fogalmának bevezetése látszott nagyon alkalmasnak. A rendparaméter az a mennyiség, mely utal arra, hogy a rendszer mennyire van messze a kritikus ponttól. A rendparamétert általában úgy definiálják, hogy az a kritikus ponton és a felett legyen zérus, míg a kritikus pont alatt értéke folytonosan változhat.

A rendparaméter bevezetésével először *Landau*-nak [2] sikerült a kritikus jelenségeket átfogóan, kvantitatív módon leírnia. *Landau* feltételezte, hogy a szabadenergia a rendparaméternek analitikus függvénye a kritikus pontban. Ezután a szabadenergiát a rendparaméter szerint sorbajektve, számszerű eredményt tudott adni arra, hogy mennyire nem folytonos például a fajhőnek vagy a szuszceptibilitásnak a viselkedése a kritikus pont közelében, azaz meg tudta határozni a megfelelő kritikus indexeket. A Landau-féle elmélet, amely tulajdonképpen nem más, mint a molekuláris tér közeletés, nem veszi figyelembe a rendszerben a kritikus pont körül végbemenő rendkívül erős fluktuációkat és így eleve nem adhat helyes eredményt. Mindazonáltal ez az elmélet a kutatás kezdeti szakaszában nagymértékben hozzájárult a kritikus jelenségekről alkotott elképzelések fejlődéséhez.



A kritikus pont közelében a rendszer egyes összetevői közötti kapcsolat, korreláció egyre erősebbé és kiterjedtebbé válik. Hogy a korreláció mennyire terjed ki a rendszerben, azt az úgynevezett korrelációs hossz adja meg, [3] ami definíciója értelmében a kritikus pontban végtelenné válik. Ez a tény volt az, ami *Kadanoff*ot [4] arra ösztönözte, hogy a kritikus jelenségeket a skálainvariancia oldaláról próbálja megközelíteni. Az általa kidolgozott blokksema és az ennek természetes matematikai leírására használt homogén függvények segítségével sikerült csodálatos összefüggéseket kapnia a kritikus indexek között. Ezek az összefüggések a skálatörvények. Meg kell jegyezni, hogy a kritikus indexek között *Kadanoff* előtt már több fizikusnak sikerült összefüggéseket találnia. Ezek az összefüggések a *Rushbrooke* [5], *Coopersmith*- [6] és *Griffiths*- [7] egyenlőtlenségek, amelyek a Kadanoff-eljárásban egyenletekbe mennek át. *Kadanoff* ugyancsak rámutatott arra, hogy bizonyos fundamentális mennyiségek (ilyenek a rendparaméter komponenseinek száma és a rendszer dimenziója) kivételével a kritikus pont körül semmiféle egyéb mennyiség nem szól bele a rendszer viselkedésébe. Ezt a gondolatot nevezzük univerzalitásnak<sup>1</sup> és ennek segítségével, adott dimenziójú és szimmetriájú rendszer esetén az elméleti leíráshoz mindig a legegyszerűbb Hamiltoniant választhatjuk. *Kadanoff* gondolata óriási lökést adott a kritikus jelenségeknek mind elméleti, mind kísérleti fejlődéséhez. A *Kadanoff* által kapott skálatörvényeket az akkorra megoldott egzakt modellekben (két-dimenziós Ising-modell, jégmodell,  $x$ — $y$  modell, dymer probléma stb.) bizonyítani lehetett. A skálatörvényeket sikerült kísérleti úton is igazolni.

Míg *Kadanoff* a skálainvarianciát és a homogenitási hipotézist sztatikus esetre alkalmazta, addig *Ferrel*, *Menyhárd*, *Schmidt*, *Schwabl* és *Szépfalussy* [8] ugyanezt a dinamikára is kidolgozták és jóslataik a kísérletekkel többnyire megegyező eredményt adtak.

A *Kadanoff*-féle elmélet nagyszerű eredményei és előnyei mellett egy nagy hátránnyal rendelkezett. Nem lehetett segítségével a kritikus indexek számszerű értékét meghatározni. Ennek a problémának a megoldása még sokáig váratott magára. Végül *Wilson*nak [9a] sikerült megtörnie a jeget. Az általa kidolgozott renormalizációs csoport és  $\varepsilon$  ( $\varepsilon = 4 - d$ ,  $d$  a rendszer dimenziója) sorfejtéssel együtt már számszerűen is meg tudta adni a kritikus indexeket, legalábbis  $d = 4$  körül. Magának a renormalizációs csoportnak az alkalmazása a kritikus jelenségek vizsgálatában nem új gondolat. A renormalizációs csoport *Gell—Mann*- és *Low*-féle változatát [10] már korábban *Fowler*, *Zawadowski* [11] és *J. Sólyom* [35], valamint *Abrikosov* és *Migdal* [12] alkalmazták a Kondó-problémára, míg *Di Castro* és *Jona-Lasinio* [13] általános kritikus viselkedést mutató rendszereket írtak le segítségével. A *Wilson*-féle és a *Gell—Mann*- és *Low*-féle renormalizációs csoport ugyanannak a problémának két különböző megfogalmazása. A *Wilson* által kidolgozott „fix-pont” formalizmus és  $\varepsilon$ -sorfejtés segítségével a *Gell—Mann*- és *Low*-féle renormalizációs csoport a kritikus indexekre a *Wilson*-módszerrel nyert eredményekkel megegyezőt ad [14, 15, 16].

Az elmúlt években még számos olyan elméleti módszer született, melyek az  $\varepsilon$ -sorfejtés, vagy a rendparaméter komponenseinek  $n$  száma szerinti sorfejtéssel [17] ugyancsak helyes eredményeket adnak a kritikus indexek értékeire. Ilyen módszerek például a *Callan—Symanzik*-egyenlet [18], vagy a *Migdal—Poljakov*-féle bootstrap eljárás [19].

<sup>1</sup> Ma már léteznek olyan modellek, melyek ellentmondanak az univerzalitási hipotézisnek [7].



Fenti módszerek közül néhányat a dinamikus kritikus jelenségekre is kidolgoztak [20], de ezen a területen még további fejlődés várható az elkövetkezendő években.

Jelen dolgozatban a Gell—Mann- és Low-féle renormalizációs csoportnak és a Kadanoff—Wilson-féle szabadsági fokok redukálásának egy új kombinációját dolgoztuk ki, mely az eddig számolt valamennyi kritikus index esetében a korábbi eredményekkel összhangban levőket ad. Ugyanakkor véleményünk szerint ez az eljárás fizikailag könnyebben érthető, és nem használ olyan absztrakt fogalmakat, mint az eredeti (ortodox) Gell—Mann- és Low-féle eljárás. A módszerbe a véges levágási impulzus ugyanúgy természetes módon illeszkedik be, mint a Wilson-féle eljárásba, de itt a Lie egyenletek egyszerű struktúrája miatt a matematikai számolás véleményünk szerint könnyebben végezhető el. Remélhető, hogy az ismertetendő eljárás, megfelelő módosításokkal, a dinamika leírására is használható lesz.

Mivel jelen dolgozat alapját a renormalizációs csoport képezi, ezért ismertetjük ennek a módszernek először legáltalánosabb Wilson-féle, majd eredeti (ortodox) Gell—Mann- és Low-féle megfogalmazását. A többi, kritikus jelenségekkel foglalkozó elmélet közül helyhiány miatt csak a Callan—Symanzik-egyenletet, illetve az ezen alapuló elmélet főbb gondolatait ismertetjük. A dolgozat második részében térünk rá az újonnan kidolgozott eljárás leírására és annak konkrét alkalmazásaira.

### 1.1. A Wilson-féle renormalizációs csoport

Annak oka, hogy a dolgozatot a Wilson-féle renormalizációs csoport ismertetésével kezdjük, noha a későbbiekben ismertetendő eljárás alapját a Gell—Mann- és Low-féle eljárás képezi, az, hogy a renormalizációs csoport Wilson-féle megfogalmazása mindenképpen általánosabb. Eddig már sikerült kimutatni azt, hogy a Wilson-féle módszerből következik a Gell—Mann- és Low-féle [21], ellenkező irányba az ekvivalenciát még senki sem tudta bizonyítani.

A továbbiakban a Wilson-féle eljárást mágneses rendszerekre alkalmazzuk. A Wilson-féle renormalizációs csoport alapvető gondolatát a következőképpen fogalmazhatjuk meg:

a) Az adott (vagy kezdeti)  $\mathcal{H}$  Hamilton-operátort transzformáljuk, vagy renormalizáljuk. Ekkor egy új  $\mathcal{H}'$  Hamilton-operátort kapunk. Formálisan felírhatjuk:

$$\mathcal{H} \Rightarrow \mathcal{H}' = R[\mathcal{H}]. \quad (1.1)$$

b) Az  $R$  renormalizációs operátor hatására a szabadsági fokok kezdeti  $\mathcal{N}$  száma (vagy spinváltozó)

$$\mathcal{N}' = \mathcal{N}/b^d \quad (1.2)$$

re csökken, ahol  $d$  a térbeli dimenziószám,  $b$  pedig egynél nagyobb értékű térbeli skálafaktor. A renormalizációs operátort többféleképpen választhatjuk meg. Egyik lehetőség az, hogy előírjuk, hatására ki kell integrálni az impulzustérben felírt Hamilton-operátor kis hullámhosszúságú (nagy impulzusú) részét. Ekkor tehát a szabadsági fokok redukálása az impulzusváltozók számának csökkentésében jelentkezik. Egy másik lehetőség, hogy  $R$ -et az eredeti  $\mathcal{N}$  számú spinváltozó közül kiválasztott  $(\mathcal{N}-\mathcal{N}')$  szerinti spurjaként definiáljuk. Ekkor a renormált Hamilton-operátor az

$$\exp \mathcal{H}' = \text{Tr}'_{\mathcal{N}-\mathcal{N}'} \{ \exp \mathcal{H} \} \quad (1.3)$$

alakban írható fel.



c) A leglényegesebb feltétel, aminek  $R$  eleget kell tennie, az, hogy hatására az állapotösszeg invariáns maradjon, azaz

$$Z_{N'}\{\mathcal{H}'\} = Z_N\{\mathcal{H}\}. \quad (1.4)$$

Könnyen látható, hogy (1.3) eleget tesz az (1.4) követelménynek.

d) Annak érdekében, hogy a szabadsági fokok (azaz a spinek) térbeli sűrűsége ne változzon meg, minden térbeli vektort  $b$  segítségével átskálázunk:

$$x \Rightarrow x' = x/b. \quad (1.5)$$

Az impulzusok ilyenkor nyilvánvalóan

$$q \Rightarrow q' = bq$$

szerint transzformálódnak.

e) Végezetül, hogy a spinek fluktuációjának nagysága is változatlan maradjon, a spinváltozókat is átskálázzuk:

$$\vec{S}_x \Rightarrow \vec{S}'_x = \vec{S}_x/c. \quad (1.6)$$

Itt  $c$  függ a  $\mathcal{H}$  Hamilton-operátortól, azaz  $c = c[\mathcal{H}]$ . Nyilvánvaló, hogy a renormalizációs operátor függ  $b$ -től és  $c$ -től. Hatására a szabadenergia sűrűsége az

$$f[\mathcal{H}'] = b^d f[\mathcal{H}] \quad (1.7)$$

képletnek megfelelően transzformálódik. Hasonlóképpen, (1.6)-ból látszik, hogy a spin-spin korrelációs függvény a

$$G(x; \mathcal{H}) = c^2 G(x/b; \mathcal{H}') \quad (1.8)$$

összefüggés szerint transzformálódik. (1.7) és (1.8) vezet el a skálatulajdonságokhoz, vagy homogenitási tulajdonságokhoz.

Miután fentiekben definiáltuk az  $R$  renormalizációs csoportot, az eljárás a következő:

i) A transzformációt iteráljuk:

$$\mathcal{H}' = R[\mathcal{H}], \quad \mathcal{H}'' = R[\mathcal{H}'], \dots \quad (1.9)$$

ii) A kezdeti Hamilton-operátor paramétereinek változtatásával megpróbáljuk meghatározni az úgynevezett fix pont Hamilton-operátort, azaz  $\mathcal{H}^*$ -t, melyet feltevés szerint az (1.9) iteráció megközelít. A fix pont Hamilton-operátort úgy definiáljuk, hogy az invariáns legyen  $R$ -el szemben, vagyis álljon fenn az

$$R[\mathcal{H}^*] = \mathcal{H}^* \quad (1.10)$$

összefüggés.

iii) Ha ezután megvizsgáljuk az (1.8) transzformációs összefüggést, akkor azt találjuk, hogy a fix pont Hamilton-operátor kritikus abban az értelemben, hogy a neki megfelelő spin-spin korrelációs függvény hosszú hatótávolságú<sup>2</sup>. (1.8)-ból  $G(x; \mathcal{H}^*)$ -

<sup>2</sup> Amennyiben a kezdeti  $\mathcal{H}$  Hamilton-operátor olyan, hogy egyáltalán képes valamilyen kritikus viselkedést leírni.



ra olyan függvényegyenletet kapunk, melynek a következő egyértelmű megoldása van:

$$G(x; \mathcal{H}^*) \sim 1/x^{2e}, \quad c^* = c[\mathcal{H}^*] = b^{-e}. \quad (1.11)$$

Mivel másrészt az  $\eta$  kritikus index a

$$G(x, T_c) \sim 1/x^{d-2+\eta} \quad (1.11')$$

összefüggéssel van definiálva, ( $T_c$  a kritikus hőmérséklet), ezért

$$c^* = b^{-(d-2+\eta)/2} \quad (1.12)$$

adódik.

Mindazon Hamilton-operátorok, melyek az iteráció során  $\mathcal{H}^*$ -hez tartanak, a Hamilton-operátorok terében egy úgynevezett kritikus felületen helyezkednek el.

IV) Hogy a rendszer viselkedését a kritikus pont körül vizsgálhassuk, a renormalizációs operátort linearizáljuk  $\mathcal{H}^*$  körül. Ekkor

$$\mathcal{H}' = R[\mathcal{H}] = R[\mathcal{H}^* + hQ] = \mathcal{H}^* + hLQ + 0(h^2), \quad (1.13)$$

ahol most  $L$  egyszerűen egy lineáris operátor (a Hamilton-operátorok terében). (1.13)-ból, valamint  $R$  csoporttulajdonságából könnyen belátható, hogy  $L(\mathcal{H}^*)$  csoporttulajdonsággal bír, nevezetesen

$$L_b(\mathcal{H}^*)L_{b'}(\mathcal{H}^*) = L_{bb'}(\mathcal{H}^*) \quad (1.13')$$

(itt  $b$  és  $b'$  két különböző skálafaktor).

V) Mivel most már renormalizációs operátorunk lineáris, ezért kereshetjük  $Q_j$  sajátoperátorait és  $l_j$  sajátértékeit, melyeket a szokásos módon az

$$LQ_j = l_j Q_j \quad (1.14)$$

egyenlettel definiálunk. Nyilvánvaló, hogy  $L$  és így sajátértékei függnék  $b$ -től, de (1.13') miatt fennáll

$$l_j = b^{\lambda_j}, \quad (1.15)$$

ahol  $\lambda_j$ -k függetlenek attól, hogyan választottuk meg  $b$ -t.  $Q_j$ -k a sajátoperátorok vagy kritikus változók spektrumát képezik. Egy szokásos megfeleltetés a következő:  $Q_1(\approx \varepsilon) \approx$  energiasűrűség,  $Q_2(\approx M) \approx$  rendparaméter vagy mágnesezettség.

vi) Végezetül a közel kritikus Hamilton-operátor sorbafejthető  $\mathcal{H}^*$  körül  $Q_j$ -k szerint:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}^* + \sum_j h_j Q_j. \quad (1.16)$$

Az  $f[\mathcal{H}]$  szabadenergiát a  $h_j$  együtthatók függvényének tekinthetjük.  $h_j$ -k a skálateretek (scaling fields). Ha  $Q_j$ -ket a fenti módon feleltetjük meg a kritikus változóknak, akkor  $h_1$  lineáris  $T$ -ben, úgy, hogy lényegében  $T - T_c \sim t \sim h_1$ . Hasonlóképpen,  $h_2$  a rendező tér (ordering field), azaz  $h_2$  ferromágnes esetén arányos a  $H$  mágneses térrel. (1.16)-ot (1.13)-ba behelyettesítve és felhasználva (1.14)-et,

$$R[\mathcal{H}] = \mathcal{H}' = \mathcal{H}^* + \sum_j h_j l_j Q_j + 0(h^2) \quad (1.17)$$



adódik. Elhagyva a nem-lineáris tagot, fentit diagonalizált rekurziós összefüggés formájában írhatjuk fel:

$$h'_j \cong l_j h_j. \quad (1.18)$$

Felhasználva (1.14)-et, valamint az (1.7) összefüggést, végezetül

$$f(h_1, h_2, h_3) \cong b^{-d} f(b^{\lambda_1} h_1, b^{\lambda_2} h_2, b^{\lambda_3} h_3, \dots) \quad (1.19)$$

adódik. A  $b$  skálafaktor itt most már lényegében tetszőleges, mivel (1.18) iterálásával azt kapjuk, hogy

$$h_j^{(n)} = l_j^n h_j = b^{n\lambda_j} h_j = (b_n)^{\lambda_j} h_j, \quad (1.20)$$

és ebben az egyenletben  $b_n = b^n$  tetszőlegesen nagynak választható.

VII (1.19) nem más, mint a skálainvarianciát magába foglaló asszimptotikus homogenitást kifejező összefüggés. Hogy ezt láthassuk, válasszuk meg  $b$ -t úgy, hogy fennálljon  $b^{\lambda_1} t = 1$ . Ne feledjük, hogy  $h_1 \approx k_1 t$  és  $h_2 \approx k_2 H$ , ahol  $k_1$  és  $k_2$  állandók. Ekkor

$$f(t, H, h_3) = t^{d/\lambda_1} f(k_1, k_2 H | t^{\lambda_2/\lambda_1}, h_3 | t^{\lambda_3/\lambda_1}, \dots). \quad (1.21)$$

Másrészt a fenomenologikus homogenitási összefüggés alapján [3]

$$f(T, H) = t^{2-\alpha} \varphi(H/t^\Delta), \quad (1.21')$$

ahol  $\Delta$  az úgynevezett gap exponens, melyre fennáll

$$\Delta = \frac{1}{2} (2 - \alpha + \gamma).$$

Összehasonlítva (1.21)-et (1.21')-el,

$$2 - \alpha = d/\lambda_1, \quad \Delta = \lambda_2/\lambda_1. \quad (1.22)$$

Hasonló megfontolásokat alkalmazva (1.8)-ra, felhasználva az (1.12) összefüggést, valamint a korrelációs függvényre vonatkozó fenomenologikus homogenitási összefüggést [3], azt kapjuk, hogy  $v = 1/\lambda_1$ .

Végezetül a fenti eljárásból négy következtetés adódik:

(A) Ha létezik fix pont Hamilton-operátor, mely körül a renormalizációs csoport linearizálható, akkor ez egyben minden olyan Hamilton-operátorra, mely eleendően közel van  $\mathcal{H}^*$ -hoz, azt jelenti, hogy a szabad energia és a korrelációs függvény asszimptotikusan homogén függvények, melyek jól meghatározott skálatranszformációknak tesznek eleget.

(B) A kritikus indexek értékei a linearizált renormalizációs operátor sajátértékeiből következnek.

(C) A Hamilton-operátorok nagy osztályára fennáll az univerzalitás, ami azt jelenti, hogy egyazon univerzalitási osztályba tartozó Hamilton-operátorok, mint kezdeti Hamilton-operátorok, ugyanarra a fix pontra vezetnek. Ennek alapján lehet csoportosítani a  $Q_k$  sajátoperátorokat releváns, irreleváns és marginális változókbá. Irrelevánsak az olyan  $Q_k$  operátorok, melyekre  $l_k < 1$  és így  $\lambda_k < 0$ . Ezek járuléka nem befolyásolhatja a kritikus indexek értékét, ami (1.20)-ból látszik.



(D) Végezetül, de nem utolsósorban a fix pont leírása lehetőséget nyújt az úgynevezett crossover jelenségek leírására.  $Q_1 \approx \varepsilon$ -n és  $Q_2 \approx M$ -n kívül egyéb olyan  $Q_j$  operátorokat is figyelembe vehetünk, melyekre  $l_j > 1$  vagy  $\lambda_j > 0$ , azaz melyek relevánsak. Mint ahogy az (1.20)-ból látható egy releváns operátor az iterálás hatására növekszik, következésképpen a rendszer instabillá válhat és így  $\mathcal{H}$  a  $\mathcal{H}^*$  fix pontból egy másik fix pontba juthat. Ehhez az új fix ponthoz új sajátértékek és így olyan kritikus indexek tartozhatnak, melyek különböznek az előbbiektől. (A  $Q_1$  és  $Q_2$ -vel kapcsolatos instabilitást úgy szüntetjük meg, hogy  $T$ -t és  $H$ -t a megfelelő kritikus értékekhez illesztjük.)

Ezután térjünk át az ortodox Gell—Mann- és Low-féle eljárás ismertetésére és nézzük meg, hogy a fentiek hogyan fogalmazhatók meg ezen eljárás keretein belül.

## 1.2. A Gell—Mann- és Low-féle multiplikatív renormalizációs csoport

A Gell—Mann és Low által kidolgozott renormalizációs eljárás eredetileg a kvantumelektrodinamika és részecskefizika területén került felhasználásra. (Az eredeti megfogalmazás a kvantumelektrodinamikára vonatkozott.) Di Castro és Jona-Lasinio [22], valamint Fowler és Zawadowski voltak az elsők, akik észrevették, hogy ez a módszer alkalmas a kritikus jelenségeknek Kadanoff által kidolgozott skálázási elméletének, illetve a Kondo-problémának a leírására. Így egy példát láthattunk arra, hogy hogyan használható egy részecskefizikai módszer statisztikus mechanikai tárgyaláshoz. Egy következő példát a fizika eme két területének „átfedésére” maga a Wilson-elmélet szolgáltat, melyet Wilson eredetileg ugyan a statisztikus fizikára fogalmazott meg, de azóta a részecskefizikában is széleskörű alkalmazást nyert. A következő fejezetben ismertetendő Callan—Symanzik-egyenlet is eredetileg a részecskefizika keretei között lett megfogalmazva, majd később a kritikus jelenségek mind sztatikus [23, 24], mind dinamikai [20] leírására sikerült felhasználni.

A Gell—Mann- és Low-féle renormalizációs csoportot csak akkor lehet felépíteni, ha ismerjük az elmélet Hamilton-operátorának (Lagrange-operátorának) pontos alakját, ugyanis éppen a Hamilton-operátor alakja dönti el, hogy az elmélet egyáltalán tárgyalható-e a Gell—Mann- és Low-féle renormalizációs csoport segítségével.

A kritikus jelenségek leírására az  $N$ -vektor modell vagy más néven az általánosított Heisenberg-modell Hamilton-operátorának folytonos alakját választjuk. Tehát a következő Hamilton-operátorral fogunk dolgozni<sup>3</sup>

$$\mathcal{H}(x) = \frac{1}{2} \sum_{\alpha=1}^N \left[ \sum_{i=1}^d (\partial_i \varphi_\alpha)^2 + m_0^2 (\varphi_\alpha)^2 \right] + \frac{\lambda}{4!} [\bar{\varphi}^2(x)]^2, \quad (1.23)$$

ahol  $\varphi_\alpha(x)$   $N$  komponensű tér és  $\bar{\varphi}(x) = \sum_{\alpha=1}^N \varphi_\alpha^2(x)$ .  $\varphi_\alpha(x)$  tulajdonképpen a spinvektor  $\alpha$ -dik komponense.  $d$  a térbeli dimenziószám, mely lehet nem egész szám. Az  $m_0^2$  csupasz tömeg, az abszolút hőmérséklet lineáris függvénye [9]. Defináljuk az elmélet két további alapvető mennyiségét, a kétrészecskés Green-függvényt és az

<sup>3</sup> Hogy ez a  $\mathcal{H}$  operátor hogyan adódik a szokásos diszkrét Heisenberg—Hamilton-operátorból, az megtalálható a [9] hivatkozásban.

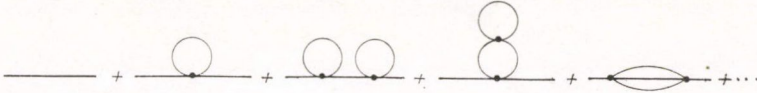


úgynevezett „amputált” egyrészcseke irreducibilis vertexfüggvényt vagy négypont-függvényt:

$$G_{\alpha\alpha}(x-x', m_0) = \langle \varphi_\alpha(x) \varphi_\alpha(x') \rangle = G(x-x', m_0), \quad (1.24)$$

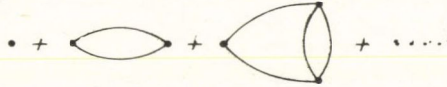
$$\begin{aligned} \gamma_{4, \alpha\beta\gamma\delta}(x_1 x_2 x_3 x_4; m_0) &= \langle \varphi_\alpha(x_2) \varphi_\beta(x_2) \varphi_\gamma(x_3) \varphi_\delta(x_4) \rangle_{\text{amp}} = \\ &= \gamma_4(x_1 x_2 x_3 x_4; m_0). \end{aligned} \quad (1.25)$$

Itt  $\langle \rangle$  a szokásos hőmérsékleti átlagot jelenti, míg az „amputálás” annak felel meg, hogy (1.25)-ben leosztunk a 4 külső vonalnak megfelelő Green-függvényvel. Az (1.23) Hamilton-operátorral megadott  $\varphi^4$ -es elmélet esetén  $G$  perturbációs sora



1. ábra

(Itt a teljes  $G$  perturbációs sorának első néhány tagja szerepel, ezért van fel-tüntetve egyrészcseke nem-irreducibilis gráf is), míg  $\gamma_4$  perturbációs sora



2. ábra

Itt az egyes vonalak a  $G^{(0)}$  csupasz Green-függvénynek vagy propagátornak felelnek meg, míg a pont a  $\lambda$  csatolást jelenti.

Mivel a Gell—Mann- és Low-féle eljárás csak multiplikatív renormálható mennyiségekre alkalmazható, a tömegrenormálás pedig nem multiplikatív [10], ezért, mielőtt továbbmennénk, végezzük el a tömegrenormálást.<sup>4</sup> Az  $m$  renormált tömeget a

$$G^{-1}(k^2, m^2)|_{k^2=-m^2} = 0 \quad (1.26)$$

összefüggéssel vezetjük be. Ez tömeghéjon történő renormálásnak felel meg a Lagrange-térelméletben. Összehasonlítva (1.26)-ot a  $\xi$  korrelációs hossz definíciójával, látszik, hogy

$$\xi \sim m^{-1}. \quad (1.26')$$

Mivel a kritikus pontban  $\xi \rightarrow \infty$ , ezért  $T=T_c$  esetén  $m=0$ . Továbbá, mivel  $\xi \sim t^{-\nu}$  ( $t \simeq (T-T_c)$ ), így  $m \sim t^{1/\nu}$ . (1.26)-ot úgy biztosíthatjuk, hogy az (1.13) Hamilton-operátor helyett a

$$\mathcal{H}(x) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \left[ \sum_{\alpha=1}^d (\partial_i \varphi_\alpha)^2 + m^2 (\varphi_\alpha)^2 \right] + \frac{\lambda}{4!} [\vec{\varphi}^2(x)]^2 + \frac{1}{2} (m_0^2 - m^2) \vec{\varphi}(x)^2 \quad (1.27)$$

<sup>4</sup> Olyan elméleteknél, ahol a renormálás a divergenciák eltávolítására szolgál, a tömegrenormálást szükségszerűen el kell végezni. A statisztikus mechanikában divergenciák (ultraibolya) sohasem jelennek meg; itt a tömegrenormálást, mint a későbbiekben látni fogjuk, kényelmi okok miatt végezzük el.



Hamilton-operátort használjuk, vagyis a szabad propagátorba,  $G^{(0)}$ -ba  $m_0^2$  helyett  $m^2$ -et írunk, tehát  $(G^{(0)})^{-1} = k^2 + m^2$  és az  $\frac{1}{2}(m_0^2 - m^2)(\varphi_a)^2$  tagot mint perturbációt kezeljük.

Mivel  $\varphi_\alpha(x)$  az  $x$  ponthoz tartozó spinvektor  $\alpha$ -dik komponense, ezért  $G$  nem más, mint a rendparaméter-rendparaméter korrelációs függvény (mágneses rendszerekben a rendparaméter a mágnesezettség, ez viszont kifejezhető a spinvektor segítségével). Tudjuk [3], hogy a rendparaméter-rendparaméter korrelációs függvény Fourier-transzformáltja,  $G(k^2, m^2)$  a  $k=0$  helyen éppen a szuszeptibilitással egyenlő, mely viszont a kritikus pontban divergál. Így

$$\chi = G(k^2 = 0, m^2) = (m^2 - \sum (0, m^2) + \sum (-m^2, m^2))^{-1} \rightarrow \infty \quad \text{midőn} \quad T \rightarrow T_c. \quad (1.28)$$

Továbbá

$$\chi = G(k^2 = 0, m^2) \underset{m^2 \rightarrow 0}{\sim} (T - T_c)^{-\gamma} \sim m^{-\gamma/\nu} \quad (1.29)$$

a  $\gamma$  index definíciója.

Az  $\eta$  kritikus index definíciója értelmében fennáll

$$G(k^2, m^2) \underset{\substack{m^2=0 \\ k \rightarrow 0}}{\sim} k^{\eta-2}. \quad (1.29')$$

Fentiekből látható, hogy mind az  $\eta$  mind a  $\gamma/\nu$  kritikus index a rendparaméter-rendparaméter korrelációs függvény valamilyen határértékével kapcsolatos. Későbbiekben látni fogjuk, hogy a többi kritikus indexre is igaz, hogy valamilyen (magasabbrendű) korrelációs függvénnyel hozható kapcsolatba.

Ezek után a Gell—Mann- és Low-féle renormalizációs csoport  $\varphi^4$ -es elméletben a következőképpen építhető fel.

(a) az 1. és 2. ábráról látható, hogy a következő invariancia tulajdonságok a perturbációs számítás tetszőleges rendjében fennállnak:

$$\begin{cases} G(k^2, m^2, A^2, \lambda; \gamma_4^{(0)}, G^{(0)}) = z G(k^2, m^2, A^2, \tilde{\lambda}; \gamma_4^{(0)} z_v, G^{(0)} z^{-1}), \\ \gamma_4(k_i^2, A^2, m^2, \lambda; \gamma_4^{(0)}, G^{(0)}) = z_v^{-1} \gamma_4(k_i^2, m^2, A^2, \tilde{\lambda}; \gamma_4^{(0)} z_v, G^{(0)} z^{-1}), \\ \tilde{\lambda} = \lambda z^2 z_v^{-1}; \quad \gamma_4^{(0)} = 1. \end{cases} \quad (1.30)$$

Itt  $A$  a levágási impulzus. A fenti transzformáció az elmélet  $S$  matrixát (matrix-elemeit) hagyja invariánsan. Vagyis míg a Wilson-elméletben a renormalizációs operátorral szemben támasztott követelmény az, hogy hatására az állapotösszeg maradjon invariáns, a Gell—Mann- és Low-féle renormalizációs operátor hatására az  $S$  mátrix mátrixelemeinek kell invariánsnak maradniuk.

(b) A két tetszőleges  $z, z_v$  állandót a  $G$  és  $\gamma_4$  függvény normálására használhatjuk fel. Defináljuk az

$$f(k^2, A^2, m^2, \tilde{\lambda}, z_v, z) = \frac{G(k^2, A^2, m^2, \tilde{\lambda}; \gamma_4^{(0)} z_v, G^{(0)} z^{-1})}{G^{(0)}(k^2, m^2)}, \quad (1.31)$$

$$\bar{\gamma}_4(k_i^2, A^2, m^2, \tilde{\lambda}, z_v, z) = \gamma_4(k_i^2, A^2, m^2, \tilde{\lambda}; \gamma_4^{(0)} z_v, G^{(0)} z^{-1}) \quad (1.32)$$

függvényeket és normáljuk ezeket az

$$f(\xi'^2, A^2, m^2, \tilde{\lambda}, z_v, z) = 1 \quad (1.33)$$

$$\bar{\gamma}_4(k_i^2, A^2, m^2, \tilde{\lambda}, z_v, z)|_{k_i^2 = \xi'^2} = 1 \quad (1.34)$$



módon. Ezen utóbbi két egyenletet  $z$ -re és  $z_v$ -re megoldva,

$$z = z(\xi'^2, A^2, m^2, \tilde{\lambda}), \quad z_v = z_v(\xi'^2, A^2, m^2, \tilde{\lambda}) \quad (1.35)$$

adódik<sup>5</sup>. Az így meghatározott  $z$ -t és  $z_v$ -t visszaírva (1.31)-be és (1.32)-be, a következő két dimenziótlan függvényt kapjuk:

$$g\left(\frac{k^2}{\xi'^2}, \frac{m^2}{\xi'^2}, \lambda_{\xi'}\right) = f(k^2, A^2, m^2, \tilde{\lambda}, z_v(\xi'^2, A^2, m^2, \tilde{\lambda}), z(\cdot)), \quad (1.36)$$

$$\bar{\gamma}'\left(\frac{k_i^2}{\xi'^2}, \frac{m^2}{\xi'^2}, \lambda_{\xi'}\right) = \bar{\gamma}_4(k_i^2, A^2, m^2, \tilde{\lambda}, z_v(\xi'^2, A^2, m^2, \tilde{\lambda}), z(\cdot)).^6$$

Itt

$$\lambda_{\xi'} = \frac{\tilde{\lambda}}{\xi'^\varepsilon}, \quad \varepsilon = 4-d. \quad (1.37)$$

(Ha  $\alpha \neq 4$ , akkor az (1.23) Hamilton-operátorban levő  $\lambda$  csatolási állandó nem dimenziótlan mennyiség.) A  $g$  és  $\bar{\gamma}'$  függvényekre fennáll a

$$g\left(1, \frac{m^2}{\xi'^2}, \lambda_{\xi'}\right) = 1, \quad \bar{\gamma}'\left(\frac{k_i^2}{\xi'^2}, \frac{m^2}{\xi'^2}, \lambda_{\xi'}\right)_{k_i^2 = \xi'^2} = 1 \quad (1.38)$$

normálási feltétel.

(c) Jelöljük  $\xi$ -vel a  $\lambda$  csatolási állandó egy másik értékéhez tartozó „referencia-impulzust”. Az (1.30) invariancia tulajdonságok  $g$  esetében a következő csoport-egyenletre vezetnek:

$$g\left(\frac{k^2}{\xi^2}, \frac{m^2}{\xi^2}, \lambda_\xi\right) = g\left(\frac{\xi'^2}{\xi^2}, \frac{m^2}{\xi^2}, \lambda_\xi\right) g\left(\frac{k^2}{\xi'^2}, \frac{m^2}{\xi'^2}, \lambda_{\xi'}\right). \quad (1.39)$$

Hasonló egyenlet érvényes  $\bar{\gamma}_4$ -re is. Itt felhasználtuk az (1.38) normálási feltételeket, melyek szerint

$$z = g\left(\frac{\xi'^2}{\xi^2}, \frac{m^2}{\xi^2}, \lambda_\xi\right), \quad z_v^{-1} = \bar{\gamma}_4\left(\frac{\xi'^2}{\xi^2}, \frac{m^2}{\xi^2}, \lambda_\xi\right). \quad (1.40)$$

A  $\tilde{\lambda}$  és  $\lambda$  közötti összefüggés, valamint az (1.40) egyenletek felhasználásával  $\lambda_{\xi'}$  explicit módon kifejezhető  $\lambda_\xi$ -vel:

$$\begin{aligned} \lambda_{\xi'} &= \lambda_R\left(\frac{\xi'^2}{\xi^2}, \frac{m^2}{\xi^2}, \lambda_\xi\right) \\ &= \lambda_\xi\left(\frac{\xi'}{\xi}\right)^{-\varepsilon} g^2\left(\frac{\xi'^2}{\xi^2}, \frac{m^2}{\xi^2}, \lambda_\xi\right) \bar{\gamma}_4\left(\frac{\xi'^2}{\xi^2}, \frac{m^2}{\xi^2}, \lambda_\xi\right). \end{aligned} \quad (1.41)$$

<sup>5</sup> Egyáltalán nem nyilvánvaló, hogy (1.33) és (1.34) szimultán teljesíthető; erről minden esetben külön számolással kell meggyőződnünk. Annak, hogy jelen esetben (1.33) és (1.34) egyidejűleg fennáll, az az ára, hogy nem tudjuk megmondani, melyik az a  $\xi'$  érték, mely az eredeti, fizikai  $f$  és  $\gamma_4$  függvénynek megfelel. Megmutatható azonban, hogy a  $\xi'$  „referencia impulzus” úgy is bevezethető, hogy a fizikai ( $z=z_v=1$ ) függvényekre való visszatérés könnyen elvégezhető. Ekkor azonban nem követelhetjük meg, hogy (1.33) és (1.34) szimultán teljesüljön. (Lásd a [16] hivatkozást.)

<sup>6</sup> (1.36)-ból látható, hogy  $g$  és  $\bar{\gamma}'$  nem függ  $A$ -tól. Belátható [16], hogy (1.33) és (1.34) normálás esetén a  $A$  függés kiesik  $g$ -ből és  $\bar{\gamma}'$ -ből.



$\lambda_R$  az elmélet „invariáns töltése” [10]. A csoporttranszformációval szemben  $\lambda_R$  invariáns:

$$\lambda_R \left( \frac{k^2}{\xi^2}, \frac{m^2}{\xi^2}, \lambda_\xi \right) = \lambda_R \left( \frac{k^2}{\xi'^2}, \frac{m^2}{\xi'^2}, \lambda_R \left( \frac{\xi'^2}{\xi^2}, \frac{m^2}{\xi^2}, \lambda_\xi \right) \right),$$

$$\lambda_R \left( 1, \frac{m^2}{\xi^2}, \lambda_\xi \right) = \lambda_\xi. \quad (1.42)$$

(d) Végezetül az (1.39) egyenletet differenciálegyenlet alakjában is felírhatjuk. Ezt kétféle módon tehetjük meg. Az egyik, hogy (1.39) mindkét oldalát  $\xi'^2$  szerint differenciáljuk, majd  $\xi'^2 = \xi^2$ -t veszünk. Ekkor

$$\sigma(y, \lambda_\xi) g(x, y, \lambda_\xi) - x \frac{\partial g(x, y, \lambda_\xi)}{\partial x} - y \frac{\partial g(x, y, \lambda_\xi)}{\partial y} + \psi(y, \lambda_\xi) \frac{\partial g(x, y, \lambda_\xi)}{\partial \lambda_\xi} = 0, \quad (1.43)$$

ahol

$$x = \frac{k^2}{\xi^2}, \quad y = \frac{m^2}{\xi^2}, \quad \sigma(y, \lambda_\xi) = \frac{\partial g(\eta, y, \lambda_\xi)}{\partial \eta} \Big|_{\eta=1},$$

$$\psi(y, \lambda_\xi) = \frac{\partial \lambda_R(\eta, y, \lambda_\xi)}{\partial \eta} \Big|_{\eta=1}. \quad (1.44)$$

A  $\varphi^4$ -es elméletben a propagátorra felírható Callan—Symanzik-egyenlet nagyon hasonlít az (1.43) egyenletre. Mint ismeretes, a Callan—Symanzik-egyenlet alkalmas, többek között, a propagátor asszimptotikus viselkedésének leírására, így nem meglepő, hogy az (1.43) egyenlet is képes az asszimptotikus viselkedést megadni. (1.43)-ban az utolsó tag sérti meg a skálainvarianciát.

A másik lehetőség, hogy (1.39)-ből differenciálegyenletet kapjunk, az, hogy az (1.44) jelöléseken kívül bevezetjük a  $t = \frac{\xi'^2}{\xi^2}$  változót, majd (1.39)-et  $x$  szerint differenciáljuk és utána  $x=t$  helyettesítést alkalmazunk. Ekkor

$$\frac{\partial g(x, y, \lambda_\xi)}{\partial x} = \frac{g(x, y, \lambda_\xi)}{x} \sigma \left( \frac{y}{x}, \lambda_R(x, y, \lambda_\xi) \right). \quad (1.45)$$

Hasonló egyenletet kapunk, ha  $y$  szerint deriválunk. Csoportelméletben az ilyen egyenletet Lie-egyenletnek nevezzük;  $\sigma$  a csoport generátora. Így tehát (1.45) a Gell—Mann- és Low-féle renormalizációs csoport Lie-egyenlete.

Természetesen sem (1.43), sem (1.45) nem oldható meg egyértelműen, ugyanis például (1.45) általános megoldása csak tetszőleges kétváltozós függvény erejéig adható meg. Ha azonban ismerjük a  $g$  függvényt valahányadik rendig perturbációszámításban, akkor (1.43)-at és (1.45)-öt felhasználhatjuk a perturbatív eredmény javítására. Ilyenkor például (1.45) jobb oldalába beírjuk  $\sigma$  perturbatív kifejezését, majd a differenciálegyenletet megoldjuk  $g$ -re. Tudjuk azonban, hogy a perturbációszámítás csak akkor alkalmazható, ha a csatolási állandó kicsi. Ha a csatolási állandó



nem kicsi, akkor (1.45) jobb oldalának kiszámításához a perturbációs sor sok tagját kellene figyelembe venni, ami vagy azt jelenti, hogy a Lie-egyenletet nem tudjuk megoldani, vagy pedig a megoldás nem elegendően sok gráf felösszegzésével ekvivalens és ilyen értelemben esetleg értelmetlen. A későbbiekben látni fogjuk, hogy a változók azon tartományában, amely a kritikus indexek számításához lényeges, a  $\lambda$  csatolási állandó  $\varepsilon (=4-d)$  nagyságrendű. Vagyis  $d=4$  körül a perturbációs számítás alkalmazható. Ilyen értelemben lényegében azt mondhatjuk, hogy a perturbációs számítás  $d=4$  körül  $\varepsilon$  sorfejtésbe megy át. A dolgozatban előforduló valamennyi mennyiséget  $\varepsilon^2$ , illetve  $\varepsilon^3$  nagyságrendig számoltuk ki. Fentiekből következik, hogy ha  $d=3$ , ami a fizikailag érdekes esetnek felelne meg, a kritikus indexek számértékeire semmit sem tudunk mondani (ekkor ugyanis  $\varepsilon=1$  és a perturbatív számolás értelmetlenné válik).

Illusztrációképpen meghatározzuk (1.45) segítségével az  $\eta$  kritikus indexet. Mivel  $\eta$  a Green-függvény kritikus pontbeli viselkedésével kapcsolatos, ezért (1.45)-ben  $y=0$  írható. Bevezetve a  $z=\ln x$  változót, anélkül, hogy a  $g$  és  $\sigma$  függvények jelölését megváltoztatnánk, (1.45) a

$$\frac{d \ln g(z, \lambda_z)}{dz} = \sigma(\lambda_R(z, \lambda_z)) \quad (1.46)$$

alakba írható. Ennek az egyenletnek a megoldása, felhasználva az (1.38) normálási feltételt,

$$g(z, \lambda_z) = e^{\int_z^{\infty} \sigma(\lambda_R(z')) dz'} \quad (1.47)$$

Ahhoz, hogy  $\eta$ -t meghatározhassuk, ennek a megoldásnak a  $z \rightarrow -\infty$  ( $k \rightarrow 0$ ) határértékét kell meghatároznunk. Vagyis kérdés, hogyan viselkedik  $\lambda_R(z)$ , midőn  $z \rightarrow -\infty$ . Ennek meghatározásához írjuk fel a  $\lambda_R$ -re vonatkozó Lie-egyenletet. Ez (1.42) alapján nyilvánvalóan

$$\frac{d\lambda_R(z)}{dz} = \Pi(\lambda_R(z)), \quad (1.48)$$

ahol

$$\Pi(\lambda_R(z)) = \frac{d}{d\eta} \lambda_R(\eta, \lambda_R(z))|_{\eta=1}. \quad (1.49)$$

A Wilson-féle fixpont hipotézis most azt jelenti, hogy

$$\Pi(\lambda_R(z)) \rightarrow 0, \quad \text{midőn } z \rightarrow -\infty. \quad (1.50)$$

Vagyis a fix pont csatolási állandót (1.41) alapján a

$$\frac{\lambda^*}{2} \left( -\varepsilon + 4 \frac{\partial g(\eta, \lambda^*)}{\partial \eta} \Big|_{\eta=1} + 2 \frac{\partial \bar{\gamma}'_4(\eta, \lambda^*)}{\partial \eta} \Big|_{\eta=1} \right) = 0 \quad (1.51)$$

egyenlet határozza meg.

Ezek után az (1.47) megoldás  $x \rightarrow 0$  határesetre vonatkozó alakja

$$g \xrightarrow{x \rightarrow 0} \left( \frac{k^2}{\xi^2} \right)^{\sigma(\lambda^*)}. \quad (1.52)$$



Innen (1.29), (1.31) és (1.36) alapján

$$\eta = 2\sigma(\lambda^*), \quad (1.53)$$

ahol  $\lambda^*$  az (1.51) egyenlet nem triviális megoldása. (Ha a  $\lambda^*=0$  triviális megoldást írjuk be, akkor a molekuláris tér közelítés által adódó  $\eta=0$  eredményt kapjuk.) Összegezve tehát, a következőket mondhatjuk:

(A) Ugyanúgy, mint a Wilson-elméletben, a fix pont hipotézis elfogadásával a Gell—Mann- és Low-féle renormalizációs csoport segítségével a Green-függvényre (1.52) homogén megoldást kapunk.

(B) A kritikus indexeket bizonyos, Lie-egyenleteknek eleget tevő korrelációs függvényekhez tartozó generátorok adják meg. (A skálatörvények általánosan is bizonyíthatóak [25].)

(C) Mivel (1.51) megoldása független a csatolási állandó kezdeti értékétől, ezért fennáll az univerzalitás<sup>7</sup>.

(D) A crossover jelenségek ugyanúgy leírhatók, mint a Wilson-féle eljárásban. Az anizotropiával kapcsolatos crossovert a 2. fejezetben tárgyaljuk.

### 1.3. A Callan—Symanzik-egyenlet

Az utóbbi időben a kritikus jelenségek tárgyalásában széleskörű alkalmazást nyert a Callan és Symanzik által, egymástól függetlenül levezetett Callan—Symanzik-egyenlet [2] (továbbiakban CS egyenlet). Ezt az egyenletet, mely bármilyen renormalizálható térelméletben felírható, eredetileg a nagyenergiás fizikában, nevezetesen az erősen rugalmatlan (deep inelastic) elektron szórásokra használták; később Brezin és munkatársai ennek az egyenletnek és a Wilson által bevezetett fix pontnak és  $\epsilon$ -sorfejtésnek a segítségével meghatározták mindazokat a kritikus indexeket, melyeket korábban Wilson a renormalizációs csoport segítségével számolt ki.

Callan eredetileg a később róla elnevezett egyenletet a renormalizálható elmélet skálatranszformációval szembeni viselkedéséből vezette le. Azóta számos más levezetés is született, ezek közül itt az egyik legegyszerűbbet ismertetjük és megmutatjuk, hogyan határozhatók meg a kritikus indexek ezen egyenlet segítségével.

Induljunk ki az (1.23) Hamilton-operátorból, mely, tudjuk, hogy renormalizálható elméletet ír le ( $\alpha < 4$  esetén az elmélet szuperrenormalizálható<sup>8</sup>). Számítsuk ki az elmélet  $\Gamma^{(n)}(p_1, \dots, p_n; m_0, \lambda)$  egyrészezske-irreducibilis Green-függvényeit, úgy, hogy a belső impulzusok szerinti integrálást valamilyen  $\Lambda$  levágásig végezzük.  $m_0$  és  $\lambda$  a renormalizált tömeg és csatolási állandó. Az így adódó Green-függvények tehát függni fognak a levágástól; az  $m_0^2$ -től való függés csak a propagátorokon keresztül jelentkezik.

Mivel

$$\frac{\partial}{\partial m_0^2} \frac{1}{k^2 + m_0^2} = -\frac{1}{(k^2 + m_0^2)^2} = \frac{1}{k^2 + m_0^2} (-1) \frac{1}{k^2 + m_0^2}, \quad (1.54)$$

<sup>7</sup> A releváns és irreleváns változóknak a Gell—Mann- és Low-féle eljárásban történő megfogalmazásával kapcsolatban lásd [25] hivatkozást.

<sup>8</sup> Az egyszerűség kedvéért legyen  $N=1$ .



ezért a tömegdifferenciálás éppen egy  $-\varphi^2/2$  operátornak a belső vonalra való „ráültetésével” egyenlő. (Vegyük észre, hogy ez az operátor 0 impulzust hordoz.) Tehát a levágástól függő Green-függvényre

$$\frac{\partial}{\partial m_0^2} \Gamma^{(n)}(\mathbf{p}; A, m_0, \lambda) = -\Gamma_{\theta}^{(n)}(0, \mathbf{p}; A, m_0, \lambda) \quad (1.55)$$

adódik, ahol jelen esetben  $\theta = \varphi^2/2$  (soft mass insertion operator).

Mivel az elmélet renormálható, ezért a levágástól való függés divergens állandókba olvasztható be.

$$\begin{aligned} \Gamma^{(n)}(\mathbf{p}; A, m_0, \lambda) &= Z^n \tilde{\Gamma}^{(n)}(\mathbf{p}; m, \tilde{\lambda}), \\ \Gamma_{\theta}^{(n)}(A, \mathbf{p}; A, m_0, \lambda) &= Z_1 Z^n \tilde{\Gamma}_{\theta}^{(n)}(A, \mathbf{p}; m, \tilde{\lambda}), \end{aligned} \quad (1.56)$$

ahol  $m$  és  $\tilde{\lambda}$  a fizikai (renormált) paraméterek, melyek értékeit megfelelő normálással rögzítjük. Ez lehet a következő:

$$\begin{aligned} \tilde{\Gamma}^{(2)}(p^2) &= (p^2 + m^2) + O(p^4), \\ \tilde{\Gamma}^{(4)}(p^2) &= -\hat{\lambda} + O(p^2), \\ \tilde{\Gamma}_{\theta}^{(2)}(A, p^2) &= 1 + O(A^2, Ap, p^2). \end{aligned} \quad (1.57)$$

Nilvánvaló, hogy  $m$  és  $\tilde{\lambda}$  komplikált függvényei  $m_0, \lambda$  és  $A$ -nak, ahol  $A$  a levágás. A véges renormált Green-függvényeket úgy számítjuk ki, hogy  $m$ -t és  $\tilde{\lambda}$ -t lerögzítjük és a  $A \rightarrow \infty$  határesetet vesszük. Ekkor  $m_0, \lambda, z_1$  és  $z$  valamennyien divergálnak, de a  $\tilde{\Gamma}^{(n)}$  függvények végesek maradnak. (Ez fejezi ki azt, hogy az elmélet renormálható.) A fenti egyenleteket összekombinálva

$$\frac{\partial}{\partial m_0^2} \Gamma^{(n)} = Z^n \left\{ \frac{\partial m^2}{\partial m_0^2} \frac{\partial}{\partial m^2} + \frac{\partial \tilde{\lambda}}{\partial m_0^2} \frac{\partial}{\partial \tilde{\lambda}} + n \frac{\partial}{\partial m_0^2} \ln Z \right\} \tilde{\Gamma}^{(n)}(p) = -Z_1 Z^n \tilde{\Gamma}_{\theta}^{(n)}(0, \mathbf{p}) \quad (1.58)$$

adódik, amit a következő alakba írhatunk át:

$$\left( m \frac{\partial}{\partial m} + \beta \frac{\partial}{\partial \tilde{\lambda}} + n\gamma \right) \tilde{\Gamma}^{(n)}(\mathbf{p}) = -m^2 \delta \tilde{\Gamma}_{\theta}^{(n)}(0, \mathbf{p}). \quad (1.59)$$

Ezt az egyenletet nevezzük CS egyenletnek<sup>9</sup>.

Itt

$$\begin{aligned} \beta &= m^2 \frac{\partial \tilde{\lambda}}{\partial m_0^2} \left( \frac{\partial m^2}{\partial m_0^2} \right)^{-1}, \\ \gamma &= m^2 \frac{\partial}{\partial m_0^2} \ln Z \left( \frac{\partial m^2}{\partial m_0^2} \right)^{-1} \Big|_{\lambda}, \\ \delta &= Z_1 \left( \frac{\partial m^2}{\partial m_0^2} \right)^{-1}. \end{aligned} \quad (1.60)$$

<sup>9</sup> Az itt használt  $\Gamma^{(n)}$  függvények amputált Green-függvények.



Ha most elvégezzük a  $\Lambda \rightarrow \infty$  határátmenetet,  $\beta, \gamma, \delta$  végtelenné válhatnak. Ugyanakkor azonban (1.57) és (1.59) felhasználásával  $\beta, \gamma, \delta$ -ra 3, csak véges mennyiségeket tartalmazó egyenleteket kaphatunk:

$$\begin{aligned} 1 + \gamma &= \delta, \\ \gamma &= -\frac{\delta}{2} m^2 \frac{\partial}{\partial p^2} \tilde{\Gamma}_{\theta}^{(2)}(0, \mathbf{p})|_{p^2=0}, \\ \beta &= 4\delta\lambda = m^2 \delta \tilde{\Gamma}_{\theta}^{(4)}(0). \end{aligned} \quad (1.61)$$

Így az (1.59) egyenlet a renormált Green-függvények közötti kapcsolatot adja meg.  $d=4$  esetén  $\beta, \gamma, \delta$  csak a dimenziótlan  $\lambda$ -tól függhetnek.

$d=4-\varepsilon$  esetén, dimenzió analízis alapján

$$\Gamma^{(n)}(sp_1, \dots, sp_n, m, u) = s^{d-\frac{(d-2)n}{2}} \Gamma^{(n)}\left(p_1 \dots p_n; \frac{m}{s}, u\right), \quad (1.62)$$

ahol  $\tilde{\lambda} = m^\varepsilon \mu$  a renormált csatolási állandó,  $u$  a dimenziótlan csatolási állandó. Így, ha az  $s \rightarrow \infty$  határeset érdekel minket, akkor a zérus tömegű elmélet tanulmányozásából indulhatunk ki. A  $\Gamma^{(n)}$  függvény eleget tesz a CS egyenletnek, melyet most írjunk az

$$\left[ m \frac{\partial}{\partial m} + \beta(u) \frac{\partial}{\partial u} - \frac{n}{2} \gamma_3(u) \right] \Gamma^{(n)} = \Delta \Gamma^{(n)} \quad (1.63)$$

alakba. Weinberg [26] tétele értelmében az asszimptotikus tartományban  $\Delta \Gamma^{(n)}$  a perturbációs számítás mindegyik rendjében elhanyagolható. A  $\beta(u)$  és  $\gamma_3(u)$  függvények most

$$\beta(u) = \frac{\varepsilon}{\frac{\partial}{\partial u} \ln \frac{u Z_1(u)}{Z_3^2(u)}}, \quad (1.64)$$

$$\gamma_3(u) = \beta(u) \frac{\partial \ln Z_3(u)}{\partial u}. \quad (1.65)$$

Itt kihasználtuk, hogy

$$\lambda = \tilde{\lambda} \frac{Z_1(u)}{Z_3(u)} \quad (1.66)$$

a csupasz (renormálatlan) töltés. Mivel  $z_1$ , és  $z_3^{10}$  (hullámfüggvény és csatolási állandó renormálási állandók) a perturbációs számításban számolhatók, ezért  $\beta(u)$  és  $\gamma_3(u)$  is meghatározható.

<sup>10</sup>  $Z_1$  és  $Z_3$  definíciója:

$$\mathcal{H}(x) = \frac{Z_3}{2} \sum_{\alpha=1}^N \left[ \sum_{i=1}^d (\partial_i \varphi_\alpha)^2 + m^2 (\varphi_\alpha)^2 \right] + \tilde{\lambda} \frac{Z_1}{4!} [\tilde{\varphi}^2(x)] + \frac{Z_3}{2} (m_0^2 - m^2) \tilde{\varphi}^2(x)$$

a renormált Hamilton-függvény, vagyis  $Z_1$  és  $Z_3$  (valamint  $\delta m^2 = m_0^2 - m^2$ ) által vannak definiálva, hogy megköveteljük, a fenti Hamilton-függvénnyel számolt mennyiségek a  $\Lambda \rightarrow \infty$  határesetben is végesek maradjanak.



A CS egyenletből  $\Gamma^{(n)}$  aszimptotikus részére

$$\Gamma_{\text{assz.}}^{(n)}(p_i; m/s, u) = \left[ \exp - \frac{n}{2} \int_u^{u(s)} du' \frac{\gamma_3(u')}{\beta(u')} \right] \Gamma_{\text{assz.}}^{(n)}(p_i; m, u(s)) \quad (1.67)$$

adódik, ahol

$$\int_u^{u(s)} \frac{du'}{\beta(u')} = \ln s. \quad (1.68)$$

Ha feltesszük, hogy  $\beta(u_\infty) = 0$  és  $\beta'(u_\infty) > 0$ , akkor  $u(s)$ -nek véges határértéke van, midőn  $s \rightarrow \infty$ . Ezt  $u_\infty$ -el jelölve,

$$\Gamma_{\text{assz.}}^{(n)}(\lambda p_i; m, u) \sim s^{d - \frac{n(d-2)}{2} - \frac{n}{2} \gamma_3(u_\infty)}. \quad (1.69)$$

Mivel másrészt az  $\eta$  kritikus index definíciója értelmében

$$\Gamma_{\text{assz.}}^{(\eta)}(sp_i) \simeq s^{d - \frac{2(d-2)}{2} - \frac{2}{2} \eta}, \quad (1.70)$$

ezért végeredményben azt kapjuk, hogy

$$\gamma_3(u_\infty) = \eta.$$

$\gamma_3(u_\infty)$  és így  $\eta$  is kifejezhető a Wilson által bevezetett anomális dimenzióval is [9]. Ha  $d_\varphi$  a  $\varphi$  tér anomális dimenziója, akkor

$$\gamma_3(u_\infty) = \eta = 2d\varphi + d - 2.^{11}$$

A többi kritikus index is valamilyen tér anomális dimenziójával kapcsolatos. (Például a  $\gamma$  index a  $d_{\varphi^2}$  anomális dimenzióval, a  $\Phi$  crossover index a  $d_{\varphi_\alpha \varphi_\beta}$  anomális dimenzióval kapcsolatos stb.). Tehát

A) A CS egyenlet segítségével is homogén megoldásokat kapunk a Green függvényekre (azaz a korrelációs függvényekre);

B) A kritikus indexek bizonyos terek anomális dimenziójával kapcsolatosak.

## 2. FEJEZET

### 2.1. A Wilson—Kadanoff-féle hosszskálázás és a Gell—Mann- és Low-féle renormalizációs csoport. Az új modell

A Kadanoff-féle skálázási elméletben a [4] fizikai kép teljesen világos. Az előírás szerint megváltoztatva a hossz mértéket, spinblokkokat készítünk, melyeknek effektív spinváltozókat feleltetünk meg. A cél a szabadsági fokok redukálása. Ezt az eljárást fejlesztette tovább Wilson [9c], azzal a különbséggel, hogy a szabadsági fokok redukálását az impulzus-térben végezte (incomplete integration theory). A redukciót végző operátort renormalizációs operátornak nevezte és kereste az ezen operátornak megfelelő transzformáció fix pontját. Ebben az esetben tehát a renormalizációs ope-

<sup>11</sup> Az anomális dimenzióval kapcsolatban lásd a 2. fejezetet.



rátornak (azon túl, hogy előírjuk: hatására az állapotösszeg maradjon invariáns) közvetlen fizikai értelmet tulajdoníthatunk (tudniillik a renormalizációs operátor, a szabadsági fokok számának redukálását végzi). Ugyanezt nem mondhatjuk el az 1.2-ben tárgyalt Gell—Mann- és Low-féle módszer renormalizációs operátoráról. Ha jobban megvizsgáljuk az (1.36) által megadott függvényeket, akkor azt látjuk, hogy azok nem is rendelkeznek közvetlen fizikai tartalommal, hiszen meglehetősen önkényes módon definiáljuk őket. Ezek a függvények már nem fejezhetők ki közvetlenül az eredeti Green-függvénnyel, vagy eredeti vertex-függvénnyel.<sup>12</sup> (Ez éppen azzal kapcsolatos, hogy nem tudjuk megmondani a  $\zeta'$  paraméter azon értékét, mely a  $z=z_v=1$  fizikai esetnek felelne meg.)

Célunk olyan modell megszerkesztése volt, mely egyrészt rendelkezik a Kadannoff—Wilson-féle hosszskálázás szemléletes képével, másrészt matematikailag a Gell—Mann- és Low-féle renormalizációs csoport viszonylag egyszerű Lie-egyenleteivel írható le. A modell alapgondolata a következő. Defináljuk a

$$d(k^2, A^2, m^2, \lambda) = \frac{G(k^2, A^2, m^2, \lambda)}{G^{(0)}(k^2, m^2)},$$

$$\Gamma(k_i^2, A^2, m^2, \lambda) = \frac{1}{\lambda} \gamma_4(k_i^2, A^2, m^2, \lambda) \quad (2.1)$$

függvényeket, ahol a jobboldalon álló mennyiségek jelentése (1.2)-ben van megadva. A fent definiált függvények olyanok, hogy perturbációs soruk eggyel kezdődik. Ezután végezzük el a következő transzformációkat:

$$d(k^2, A^2, m^2, \lambda) \rightarrow d(k^2, \tilde{A}^2, m^2, \tilde{\lambda}),$$

$$\Gamma(k_i^2, A^2, m^2, \lambda) \rightarrow \Gamma(k_i^2, \tilde{A}^2, m^2, \tilde{\lambda}). \quad (2.2)$$

Tehát  $(A, \lambda)$ -ról  $(\tilde{A}, \tilde{\lambda})$ -ra térünk át. Gyakorlatilag azt mondhatjuk, hogy skálatranszformációt hajtottunk végre az impulzustérben (ez kapcsolatos a Kadannoff—Wilson-féle hosszskálázással) és ugyanakkor megváltoztattuk a csatolási állandót is. Kérdés, vajon az így kapott  $d$  és  $\Gamma$  függvény milyen kapcsolatban van az eredeti  $d$  és  $\Gamma$  függvénnyel. Tételizzük fel a következő összefüggéseket:

$$d\left(\frac{k^2}{A^2}, \frac{m^2}{A^2}, u\right) = z_1 \left(\frac{\tilde{A}^2}{A^2}, u\right) d\left(\frac{k^2}{\tilde{A}^2}, \frac{m^2}{\tilde{A}^2}, \tilde{u}\right), \quad (2.2a)$$

$$\Gamma\left(\frac{k_i^2}{A^2}, \frac{m^2}{A^2}, u\right) = z_2 \left(\frac{\tilde{A}^2}{A^2}, u\right) \Gamma\left(\frac{k_i^2}{\tilde{A}^2}, \frac{m^2}{\tilde{A}^2}, \tilde{u}\right), \quad (2.2b)$$

$$\tilde{u} = u \left(\frac{A}{\tilde{A}}\right)^6 z_1^2 z_2, \quad (2.2c)$$

<sup>12</sup> Mint ahogy arra már az előzőekben utaltunk, ez a probléma valójában kiküszöbölhető és (1.36) helyett bevezethetünk olyan függvényeket is, melyek közvetlen fizikai tartalommal bírnak. Ekkor azonban nem követelhetjük meg (1.33) és (1.34) szimultán teljesülését.



ahol  $u = \Lambda^{-\varepsilon} \lambda$  a dimenziótlan csatolási állandó ( $d=4-\varepsilon$  dimenzióban a csatolási állandó (impulzus)<sup>e</sup> dimenziójú),  $z_1$  és  $z_2$  csak dimenziótlan mennyiségektől, azaz  $\frac{\tilde{\Lambda}^2}{\Lambda^2}$ -tól és  $u$ -tól függő állandók<sup>13</sup>. A (2.2a, b, c) összefüggések az általunk felállított modell alapvető feltételezései. Összehasonlítva ezeket az egyenleteket (1.30)-cal, láthatjuk, hogy a formai hasonlóság nagy, ugyanakkor azonban tartalmilag ezek az egyenletek lényegesen különböznek egymástól. Az (1.30) összefüggések a perturbációs sorok egzakt invariancia tulajdonságát fejezik ki, míg a (2.2a, b, c) egyenletek azon feltevést fejezik ki, hogy ha az impulzustérbeli fizikai  $\Lambda$  levágásról egy másik  $\tilde{\Lambda}$  levágásra térünk át, valamint a csatolási állandót a (2.2c) összefüggésnek megfelelően változtatjuk meg, akkor  $z_1$  és  $z_2$  csak a  $\frac{\tilde{\Lambda}^2}{\Lambda^2}$  és  $u$  dimenziótlan mennyiségek függvényei lehetnek. A továbbiakban be fogjuk bizonyítani, hogy a perturbációs számítás második rendjéig ( $d$  esetében harmadrendig) a  $z_1 z_2$  mennyiségek valóban csak a  $\frac{\tilde{\Lambda}^2}{\Lambda^2}$  és  $u$  dimenziótlan mennyiségektől függenek. Lényegében tehát azt mondhatjuk, hogy elfogadjuk a (2.2a, b, c) egyenleteket, majd a posteriori igazoljuk őket. Ha azonban sikerül kimutatni, hogy a (2.2a, b, c) egyenletek fennállnak, akkor rögtön beláthatjuk, hogy a  $(\Lambda, u) \rightarrow (\tilde{\Lambda}, \tilde{u})$  transzformáció hatására az elmélet  $S$  matrixának matrixelemei invariánsak maradnak. Ilyen értelemben tehát modellünk ekvivalens az ortodox Gell—Mann- és Low-féle eljárással, csak míg ott ezen invarianciát a

$$\delta S_{\alpha\beta} = \frac{\partial S_{\alpha\beta}}{\partial \xi} \delta \xi + \frac{\partial S_{\alpha\beta}}{\partial \lambda} \delta \lambda = 0 \quad (2.3a)$$

egyenlet fejezte ki, most a

$$\delta S_{\alpha\beta} = \frac{\partial S_{\alpha\beta}}{\partial \Lambda} \delta \Lambda + \frac{\partial S_{\alpha\beta}}{\partial u} \delta u = 0 \quad (2.3b)$$

egyenlet fejezi ki ugyanezt.

A  $z_1 z_2$  állandókat a (2.2a, b, c) egyenletekből a következőképpen határozzuk meg:

$$z_1 = \frac{d\left(\frac{\tilde{\Lambda}^2}{\Lambda^2}, \frac{m^2}{\Lambda^2}, u\right)}{d\left(1, \frac{m^2}{\tilde{\Lambda}^2}, \tilde{u}\right)} = z_1 \left(\frac{\tilde{\Lambda}^2}{\Lambda^2}, u\right), \quad (2.4a)$$

$$z_2 = \frac{\Gamma\left(\frac{k_i^2}{\Lambda^2}, \frac{m^2}{\Lambda^2}, u\right)\Big|_{k_i^2=\tilde{\Lambda}^2}}{\Gamma\left(\frac{k_i^2}{\tilde{\Lambda}^2}, \frac{m^2}{\tilde{\Lambda}^2}, \tilde{u}\right)\Big|_{k_i^2=\tilde{\Lambda}^2}} = z_2 \left(\frac{\tilde{\Lambda}^2}{\Lambda^2}, u\right). \quad (2.4b)$$

<sup>13</sup>  $z_1$  és  $z_2$ , valamint a továbbiakban előforduló összes  $z$ -faktor konkrét értékét a  $D$  függvényben adjuk meg.



Ezt visszaírva (2.2a, b)-be,

$$d(x, y, u) = \frac{d(t, y, u)}{d\left(1, \frac{y}{t}, \tilde{u}\right)} d\left(\frac{x}{t}, \frac{y}{t}, \tilde{u}\right), \quad (2.5a)$$

$$\Gamma(x, y, u) = \frac{\Gamma(t, y, u)}{\Gamma\left(1, \frac{y}{t}, \tilde{u}\right)} \Gamma\left(\frac{x}{t}, \frac{y}{t}, \tilde{u}\right), \quad (2.5b)$$

ahol az

$$x = \frac{k^2}{\Lambda^2}, \quad y = \frac{m^2}{\Lambda^2}, \quad t = \frac{\tilde{\Lambda}^2}{\Lambda^2}$$

jelöléseket használtuk.

Nyilvánvaló, hogy a (2.2c) és (2.4a, b) egyenletekből az

$$\tilde{u} = u t^{-\varepsilon/2} \frac{d^2(t, y, u)}{d^2\left(1, \frac{y}{t}, \tilde{u}\right)} \frac{\Gamma(t, y, u)}{\Gamma\left(1, \frac{y}{t}, \tilde{u}\right)} \quad (2.5c)$$

egyenlet is következik.

Vezessük be a modell „invariáns töltését” a következő módon:

$$u_R\left(\frac{k^2}{\Lambda^2}, u\right) = u\left(\frac{k^2}{\Lambda^2}\right)^{-3/2} z_1^2\left(\frac{k^2}{\Lambda^2}, u\right) z_2\left(\frac{k^2}{\Lambda^2}, u\right). \quad (2.6)$$

A csoporttulajdonságokat kifejező (2.2a, b) egyenletek segítségével bebizonyítható, hogy a  $(\Lambda, u) \rightarrow (\tilde{\Lambda}, \tilde{u})$  transzformáció hatására

$$u_R\left(\frac{k^2}{\Lambda^2}, u\right) = u_R\left(\frac{k^2}{\tilde{\Lambda}^2}, \tilde{u}\right)^{15}. \quad (2.7)$$

Ezekután felírhatjuk a megfelelő Lie-egyenleteket. A (2.5a, b) és (2.7) egyenleteket kifejezhetjük a

$$\varrho(x, y, u) = z \varrho\left(\frac{x}{t}, \frac{y}{t}, \tilde{u}\right) \quad (2.8)$$

alakban. (Itt  $\varrho$  a  $d, \Gamma, u_R$  függvények bármelyikét jelentheti; ha  $\varrho = u_R$  akkor nyilvánvalóan  $z=1$ ). Differenciáljuk (2.9)-et  $x$  szerint, majd végezzük el az  $x=t$  helyettesítést. Figyelembe véve, hogy  $u_R(t, u) = \tilde{u}$ , végül is

$$\frac{\partial}{\partial x} \ln \varrho(x, y, u) = \frac{1}{x} \frac{\partial}{\partial \eta} \left[ \ln \varrho\left(\eta, \frac{y}{x}, u_R(x, u)\right) \right]_{\eta=1} \quad (2.9)$$

<sup>14</sup> A (2.5c) kifejezés nyilvánvalóan formális, hiszen a  $z_1$  és  $z_2$ -re tett feltevés szerint (amely szerint csak  $\frac{\tilde{\Lambda}^2}{\Lambda^2}$ -től és  $u$ -tól függenek), valamint (2.2c) miatt a jobboldal nem függ  $y$ -től.

<sup>15</sup> Természetesen ugyanez a helyzet, ha az  $m$  változót skálázzuk, vagyis

$$u_R\left(\frac{m^2}{\Lambda^2}, u\right) = u_R\left(\frac{m^2}{\tilde{\Lambda}^2}, \tilde{u}\right).$$



adódik<sup>16</sup>. Fenti egyenlet az általunk módosított Gell—Mann- és Low-féle modell Lie-egyenlete.

Ismételten alá kívánjuk húzni, hogy a (2.9) egyenlet csak a perturbációs számítás egyes rendjeinek kiszámításával igazolható, közvetlenül, általánosan bebizonyítani nem lehet. (Legalábbis mindezekig nem sikerült.)

A továbbiakban a (2.9) egyenlet és a Wilson-féle fix pont és  $\varepsilon$ -sorfejtés segítségével meg fogjuk határozni az  $\eta$ ,  $\nu$ ,  $\gamma$ ,  $\alpha$ ,  $\varphi$  és  $\omega$  kritikus indexeket, ahol  $\alpha$  a fajhő szingularitásával kapcsolatos,  $\varphi$  a Riedel és Wegner [27] által bevezetett crossover index, míg  $\omega$  [28] a skálatörvényekhez adódó korrekciókban jelenik meg.

## 2.2. A fix pont csatolási állandó

A Wilson-féle elmélet alapvető feltevése, hogy a kritikus pontban a renormalizációs transzformációnak van fix pontja. Ez azt jelenti, hogy ha meg akarjuk határozni a fix pont csatolási állandót, akkor renormalizációs transzformációnkat az  $m^2=0$  ( $T=T_c$ ) pontban kell elvégeznünk. A korábban bevezetett változókat használva, ez azt jelenti, hogy  $y=0$ ,  $x \neq 0$ . Az „invariáns töltésre” vonatkozó Lie egyenlet ebben az esetben

$$\frac{d}{dx} u_R(x, u) = \frac{1}{x} \frac{\partial}{\partial \eta} \Phi_1(\eta, u_R(x, u))|_{\eta=1}, \quad (2.10)$$

ahol

$$\Phi_1(\eta, u) = u\eta^{-\varepsilon/2} \frac{d^2(\eta, u)}{d^2(1, \tilde{u})} \cdot \frac{\Gamma(\eta, u)}{\Gamma(1, \tilde{u})} \quad (2.11)$$

( $\tilde{u}=u_R(t, u)$ ). A (2.10) egyenlet  $u^*$  fix pontját a  $\frac{\partial}{\partial \eta} \varphi_1(\eta, u^*)|_{\eta=1}=0$  feltételből [29] határozhatjuk meg. Ez (2.11) és (2.6) alapján azt jelenti, hogy

$$u^* \left\{ -\frac{\varepsilon}{2} + 2 \frac{d}{d\eta} z_1(\eta, u^*)|_{\eta=1} + \frac{d}{d\eta} z_2(\eta, u^*)|_{\eta=1} \right\} = 0. \quad (2.12)$$

(2.12)  $u^*=0$  megoldása a Gauss-i fix pontot adja, melyből a molekuláris tér közelítéssel adódó kritikus indexeket reprodukálhatjuk. (2.12) nem-triviális megoldása  $\varepsilon^2$  rendig

$$K_d u^* = \frac{6}{8+N} \varepsilon \left[ 1 + \varepsilon \frac{3(3N+14)}{(N+8)^2} \right] + O(\varepsilon^3). \quad (2.13)$$

A perturbációs számolás az  $A$  függelékben van részletezve. A (2.13)-ban megjelenő, dimenziószámtól függő  $K_d$  állandó jelentése szintén az  $A$  függelékben van megadva.<sup>17</sup> Az univerzalitást az a tény fejezi ki, hogy (2.13) jobb oldalán nem szerepel az  $u$  kezdeti fizikai csatolási állandó, vagyis a kritikus pontban a rendszer viselkedése független a kezdeti paraméterek értékétől.

<sup>16</sup> Ez az egyenlet a  $k^2$  impulzus skálázásának eredménye. A  $\nu$  kritikus index meghatározásához az  $m^2$  tömeget kell majd skáláznunk és így majd  $y$ -ban kapunk Lie-egyenletet. Ennek részleteit lásd a 2.4 részben.

<sup>17</sup> Mivel a perturbációs számításban  $u$  mindig  $K_d$ -vel együtt jelenik meg, ezért célszerű rögtön az  $uK_d$  mennyiség fix pontját számítani.



A későbbiek folyamán szükségünk lesz a (2.10) egyenlet  $u^*$  közelében érvényes megoldására, ezért oldjuk meg ezt az egyenletet ebben a tartományban. Legyen

$$\psi_1(u_R) = \frac{\partial}{\partial \eta} \Phi_1(\eta, u_R)|_{\eta=1}.^{18} \quad (2.15)$$

Ezen jelölés segítségével (2.10)-ből a

$$\frac{d}{dx} u_R = \frac{1}{x} \psi_1(u_R) \quad (2.16)$$

egyenletre jutunk. Mivel ezen egyenlet  $u^*$  körüli megoldását keressük, ezért fejtsük sorba  $\Psi_1(u_R)$ -t  $u^*$  körül. Figyelembe véve, hogy  $\Psi_1(u^*)=0$ ,

$$\frac{d}{dx} u_R = \frac{1}{x} \psi'_1(u^*)(u_R - u^*) \quad (2.17)$$

adódik, ahol  $\psi'_1(u^*) = \frac{d\Psi_1(u_R)}{du_R}|_{u_R=u^*}$ . A (2.17) differenciálegyenlet megoldása

$$u_R(x) = Cx^{\psi'_1(u^*)} + u^* \quad (C=\text{állandó}). \quad (2.18)$$

Ezt az eredményt a skálatörvényekhez adódó korrekciók kiszámításánál fogjuk használni. (Lásd 2.7 részt.) (2.18)-ból látható, hogy az  $u^*$  fix pont akkor stabil, ha  $\psi'_1(u^*) > 0$ .

### 2.3. Az $\eta$ kritikus index meghatározása

Ahhoz, hogy az  $\eta$  kritikus indexet meghatározhassuk, az (1.11') definíció értelmében ki kell számítanunk a Green-függvényt a kritikus pontban.  $G$  helyett  $d$ -t fogjuk meghatározni (a  $G$  és  $d$  közötti összefüggést (2.1) adja meg). A  $d$  függvényre vonatkozó Lie-egyenlet, (2.9) alapján

$$\frac{d}{dx} \ln d(x, u) = \frac{1}{x} \psi_2(u_R(x, u)), \quad (2.19)$$

ahol

$$\psi_2(u_R(x, u)) = \frac{\partial}{\partial \eta} \ln d(\eta, u_R(x, u))|_{\eta=1}. \quad (2.20)$$

A (2.19) differenciálegyenlet  $d(x=1, u) = d_0$  kezdeti feltételt kielégítő megoldása

$$d(x, u) = d_0 e^{\int_1^x \frac{\psi_2(1, u_R(x', u))}{x'} dx'}. \quad (2.21)$$

<sup>18</sup> A bevezetett  $\Psi_1(u_R)$  függvény minden gyakorlati alkalmazás szempontjából ekvivalens a CS egyenletben szereplő  $\beta$  függvénnyel.



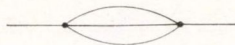
$\eta$  definíciója értelmében ennek az eredménynek az  $x \rightarrow 0$  ( $k^2 \rightarrow 0$ ) asszimptotikus alakját kell vennünk. Mivel ekkor  $u_R \rightarrow u^*$ , ezért

$$d \xrightarrow[k^2 \rightarrow 0]{} e^{\Psi_2(u^*) \int_1^{\infty} \frac{1}{x'} dx'} = x^{\Psi_2(u^*)}. \quad (2.22)$$

Tehát (1.11') és (2.1) alapján

$$\eta = 2\psi_2(u^*). \quad (2.23)$$

A  $d$  függvény perturbációs sorához a következő gráfok adnak járulékot: másodrendben



harmadrendben



(Az elsőrendű járulék a Hamilton-operátorban levő levonási tag miatt kiesik.) Az egyes gráfok járulékait és kombinatorikai faktorát az A. függelékben adjuk meg. Ezek alapján a  $d$  függvény harmadrendig

$$d(x, u) = 1 + \frac{2+N}{144} (u K_d)^2 \left[ \left( 1 + \frac{9\varepsilon}{4} \right) \ln x - \frac{5}{2} \right] - \frac{(8+N)(2+N)}{108 \cdot 16} (u K_d)^3 [-\ln^2 x + 5 \ln x]^{19}. \quad (2.24)$$

Innen

$$\Psi_2(u^*) = \frac{2+N}{144} (u^* K_d)^2 \left( 1 + \frac{9\varepsilon}{4} \right) - \frac{(8+N)(2+N)}{108 \cdot 16} 5 \cdot (u^* K_d)^{19}. \quad (2.25)$$

(2.25), (2.23) és (2.13) alapján végeredményben

$$\eta = \frac{2+N}{2(8+N)} \varepsilon \left[ 1 + \varepsilon \left( \frac{6(3N+14)}{(8+N)^2} + \frac{1}{4} \right) \right] \quad (2.26)$$

adódik. Ez az eredmény megegyezik a Wilson-elmélet és a CS egyenlet alapján számított  $\eta$  értékkel.

## 2.4. A $v$ kritikus index meghatározása

A  $v$  indexet a következőképpen határozhatjuk meg. Az  $m$  fizikai tömeg definíciója értelmében fennáll az

$$m^2 + \sum' (-m^2, m^2) - Z(0, 0) = (m_0^2 - m_{c0}^2) \sim (T - T_c) \sim m^{1/v} \quad (2.27)$$

összefüggés. Itt felhasználtuk azt, hogy

$$(T - T_c) \sim t \sim m^{1/v}. \quad (2.28)$$

<sup>19</sup> A gráfok járuléka mindig a  $\Lambda^2 \gg (k^2) (\gg m^2)$  esetre van megadva.



(2.27) annak a következménye, hogy az 1.2-ben bevezetett renormált tömeg és az  $m_0$  csupasz tömeg között fennáll az

$$m_0^2 = m^2 + \Sigma(-m^2, m^2) \quad (2.29)$$

reláció, ahol  $\Sigma$  a

$$G(k^2, m_0^2, \Lambda^2) = (k^2 + m_0^2 - \Sigma(k^2, m_0^2, \Lambda^2))^{-1} \quad (2.30)$$

összefüggéssel definiált sajátenergia. (2.29)-ből látható, hogy

$$m_{0c}^{20} = \Sigma((0, 0, \Lambda^2), \quad (2.31)$$

ahol  $m_{0c}$  a csupasz tömeg kritikus ponthoz tartozó értéke. (2.28)–(2.31) alapján (2.27) azonnal felírható.

Átírva (2.27)-et,

$$1 + \frac{\Sigma(-m^2, m^2, \Lambda^2) - \Sigma(0, 0, \Lambda^2)}{m^2} \underset{m^2 \sim 0}{\simeq} (m)^{\left(\frac{1}{v}-2\right)} \quad (2.32)$$

adódik. (2.32) szelfkonzisztencia egyenlet a  $v$  indexre,

Vezessük be a

$$\bar{d}\left(\frac{m^2}{\Lambda^2}, u\right) = 1 + \frac{\Sigma(-m^2, m^2, \Lambda^2, u) - \Sigma(0, 0, \Lambda^2, u)}{m^2} \quad (2.33)$$

függvényt. Tételezzük fel, hogy a  $(\Lambda, u) \rightarrow (\tilde{\Lambda}, \tilde{u})$  renormalizációs transzformáció után fennáll a

$$\bar{d}\left(\frac{m^2}{\Lambda^2}, u\right) = z_3\left(\frac{\tilde{\Lambda}^2}{\Lambda^2}, u\right) \bar{d}\left(\frac{m^2}{\tilde{\Lambda}^2}, \tilde{u}\right) \quad (2.34)$$

összefüggés. Ha elfogadjuk (2.34)-et és  $z_3$ -at a

$$z_3(t, u) = \frac{\bar{d}(t, u)}{\bar{d}(1, \tilde{u})} \quad (2.35)$$

egyenlet alapján határozzuk meg (itt  $\tilde{u}$ -t (2.2c) definiálja), akkor (2.34)-ből és (2.35)-ből azonnal adódik a

$$\frac{d}{dy} \ln \bar{d}(y, u) = \frac{1}{y} \psi_3(u_R(y, u)) \quad (2.36)$$

Lie-egyenlet, ahol

$$\psi_3(u) = \frac{\partial}{\partial \eta} \ln \bar{d}(\eta, u)|_{\eta=1}. \quad (2.37)$$

(2.36)  $\bar{d}(y=1, u) = \bar{d}_0$  kezdeti feltételhez tartozó megoldása

$$\bar{d}(y, u) = \bar{d}_0 e^{1 \int_1^y \frac{\psi_3(1, u_R(y', u))}{y'} dy'}. \quad (2.38)$$

$v$  meghatározásához  $\bar{d}$ -nak  $y \rightarrow 0$  asszimptotikus értékét kell vennünk. Ehhez szükségünk van az  $u_R(y, u)$  invariáns töltés  $y \rightarrow 0$  értékének kiszámításához. Ez azt jelenti, hogy az  $u_R(y, 0)$ -ra vonatkozó Lie-egyenletet kell megoldanunk, illetve a



megfelelő fix pontot kell meghatároznunk. Jelen esetben a  $(A, u) \rightarrow (\tilde{A}, \tilde{u})$  transzformáció hatására a  $d$  és  $\Gamma$  függvények (feltevésünk szerint) a

$$d\left(\frac{m^2}{A^2}, u\right) = z'_1 d\left(\frac{m^2}{\tilde{A}^2}, \tilde{u}\right), \quad (2.38a)$$

$$\Gamma\left(\frac{m^2}{A^2}, u\right) = z'_2 \Gamma\left(\frac{m^2}{\tilde{A}^2}, \tilde{u}\right) \quad (2.38b)$$

egyenleteknek megfelelően változnak meg. A konkrét számolás azt mutatja, hogy  $z'_1 = z'_1$  és  $z'_2 = z'_2$ , ami azt jelenti, hogy  $u_R(x=0, y) = u_R(x, y=0)$ . amiből viszont következik, hogy  $u_R(x=0, y \rightarrow 0) \rightarrow u^*$ . A két határesetben számított fix pont így módon ugyanaz, tehát felhasználhatjuk az  $m^2 \sim y=0$  esetben számított értékeket.<sup>20</sup> A két határeseten túlmenően ki kéne számítanunk a két változótól függő  $u_R(x, y)$  függvényt általános  $x$ -re és  $y$ -ra, amit azonban számítástechnikai okok miatt nem végeztünk el. Ezután ugyanúgy járva el, mint  $\eta$  esetén, felhasználva  $v$  definícióját és a (2.32), (2.33) összefüggéseket, végül is azt kapjuk, hogy

$$\psi_3(u^*) = \frac{1}{2v} - 1. \quad (2.39)$$

A  $\bar{d}$  függvényhez ugyanazok a gráfok adnak járulékot, mint  $d$ -hez, azzal a különbséggel, hogy most van elsőrendű járulékos is és ez a Hartree-loop. Az A. függelékben



megadott értékek alapján a  $\bar{d}$  függvény másodrendig

$$\begin{aligned} \bar{d}(y, u) = & 1 - \frac{2+N}{12} (u K_d) \left[ \ln y - \frac{\varepsilon}{4} \ln^2 y \right] + \\ & + \frac{2+N}{144} (u K_d)^2 [-3 \ln^2 y + 5 \ln y]. \end{aligned} \quad (2.40)$$

Innen

$$\psi_3(u^*) = -\frac{1}{2} \frac{2+N}{8+N} \varepsilon \left[ 1 + \varepsilon \frac{13N+44}{2(8+N)^2} \right]. \quad (2.41)$$

Végeredményben, (2.39) és (2.41) alapján

$$2v = 1 + \frac{2+N}{2(8+N)} \varepsilon \left[ 1 + \frac{\varepsilon}{2} \frac{N^2+33N+60}{(8+N)^2} \right]. \quad (2.42)$$

Ez az eredmény szintén megegyezik a korábban számolt értékekkel.

<sup>20</sup> Wilsonnak ahhoz, hogy a  $k^2=0$  esetben számolni tudjon ( $\delta$  a  $\gamma$  indexet határozza meg így [9d])-külön ansatzra van szüksége, hogy belássa, hogy a  $k^2=0$  esetben a kritikus indexek meghatározásához ugyanazt a csatolási állandót kell használni, melyet az  $m^2=$  esetben, mint fix pontot határozott meg. A  $k^2=0$  esethez tartozó, ansatz útján meghatározott csatolási állandót azonban  $\delta$  nem nevezheti fix pontnak. A mi esetünkben a differenciálegyenletek fix pontjainak definíciója alapján egyszerűen kiadódik, hogy a két fix pont ugyanaz, és semmiféle ansatzra nincs szükség.



## 2.5. Anomális dimenzió és a Gell—Mann- és Low-féle renormalizációs csoport

Terek anomális dimenzióját *Wilson* vezette be [30]. Az anomális dimenzió fontos szerepet játszik az úgynevezett rövidtávolságú operátor kifejtésben (short-distance operátor expansion) [18, 30, 31] és a kritikus jelenségek tárgyalásában. A kritikus indexeknek, az anomális dimenzió ismeretében történő kiszámítása megtalálható a [9c, 23] hivatkozásokban. A [32] hivatkozásban a szerzők a  $\varphi^4$ -es elméletben, magasabbrendű terek anomális dimenziójának felhasználásával meghatározták a korrelációs függvények aszimptotikus viselkedését a skálázási tartományon (scaling regime) belül.

Az erősen rugalmatlan elektronszórások struktúra függvényeire vonatkozó Callan—Gross- és Cornwall—Norton-összegszabályokat is bizonyos tenzoroperátorok anomális dimenziója határozza meg. Ezeket az anomális dimenziókat *B. Hu*[33] számította ki. (Az anomális dimenzióknak a Gell—Mann- és Low-féle renormalizációs csoport segítségével történő meghatározásával kapcsolatban lásd a [15] hivatkozást.) Magasabbrendű terek anomális dimenziójának kiszámítása nem könnyű feladat. A továbbiakban meg fogjuk mutatni, hogy az általunk kidolgozott modellben milyen egyszerűen határozhatók meg magasabbrendű terek anomális dimenziója.

Az  $A$  tér  $d_A$  anomális dimenzióját a

$$\Gamma_A^{(n)}(k_1, k_2, \dots, k_n; T_c) = s^{(n-1)d - nd_A} \Gamma_A^{(N)}(sk_1, sk_2, \dots, sk_n; T_c) \quad (2.43)$$

összefüggéssel definiáljuk, ahol

$$(2\pi)^d \delta \left( \sum_{i=1}^n k_i \right) \Gamma_A^{(n)}(k_1, \dots, k_n; T_c) = \int \prod_{i=1}^n d^d x_i e^{i \sum_{j=1}^n k_j x_j} \langle A(x_1) \dots A(x_n) \rangle \quad (2.44)$$

az  $n$ -pont függvény, vagy  $n$ -részcsekés korrelációs függvény Fourier-transzformáltja.  $T_c$  a kritikus hőmérséklet. Térelméleti nyelven (2.43) a nulla tömegű  $n$ -pont függvényre fejez ki összefüggést.

Ezek után első példaként határozzuk meg az (1.27) Hamilton-operátorral definiált elméletben az általunk kidolgozott modell felhasználásával a  $\varphi^2$  tér  $d_{\varphi^2}$  anomális dimenzióját. (2.43) alapján a

$$\chi'(x-y) = \sum_x \langle \varphi_x^2(x) \varphi_\beta(y) \varphi_\gamma(0) \rangle^{21}$$

függvény  $\chi'(k)$  Fourier-transzformáltjára a  $T=T_c$  pontban fennáll

$$\chi'(k) \underset{k \rightarrow 0}{\sim} k^{-2d_\varphi + d_{\varphi^2}}, \quad (2.45)$$

ahol  $d_\varphi$  a  $\varphi$  tér anomális dimenziója, mely (2.43) értelmében a

$$2d_\varphi = d - 2 + \eta \quad (2.46)$$

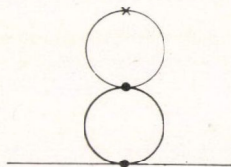
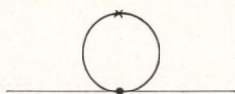
módon függ össze  $\eta$ -val. Mivel  $\eta$  értékét már kiszámítottuk,  $d_{\varphi^2}$ -t ismertnek vehetjük.

<sup>21</sup>  $\chi'$  ugyanúgy amputált függvény, mint az 1.3-ban használt függvények. (Vagyis a  $\beta$  és  $\gamma$  vonalaknak megfelelő propagátorokkal leosztottunk.)

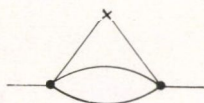


$\chi'$  perturbációs sorában a következő gráfok lépnek fel:

elsőrendben



másodrendben



Itt  $x$  a  $\varphi^2$ -es vertexet jelöli. Mivel  $\chi'$  nulladrendben 2, ezért, hogy 1-el kezdődő függvénnyel dolgozhassunk, vezessük be  $\chi_1 = \frac{1}{2} \chi'$ -t. Tételezzük fel, hogy a  $(\Lambda, u) \rightarrow (\tilde{\Lambda}, \tilde{u})$  transzformáció hatására  $\chi_1$  a következő módon viselkedik:

$$\chi_1 \left( \frac{k^2}{\Lambda^2}, u \right) = z_4 \left( \frac{\tilde{\Lambda}^2}{\Lambda^2}, u \right) \chi_1 \left( \frac{k^2}{\tilde{\Lambda}^2}, \tilde{u} \right). \quad (2.47)$$

Ha ez az egyenlet fennáll és  $z_4$ -et a

$$z_4(t, u) = \frac{\chi_1(t, u)}{\chi_1(1, \tilde{u})} \quad (2.48)$$

módon határozzuk meg, akkor  $x_1$ -re a

$$\frac{d}{dx} \ln \chi_1(x, u) = \frac{1}{x} \psi_4(u_R(x, u)) \quad (2.49)$$

Lie-egyenletet kapjuk, ahol

$$\psi_4(u) = \frac{\partial}{\partial \eta} \ln \chi_1(\eta, u)|_{\eta=1}. \quad (2.50)$$

Ezek után a korábbiakhoz teljesen hasonlóan járunk el, és így a

$$\psi_4(u^*) = -d_\varphi + \frac{d_{\varphi^2}}{2} \quad (2.51)$$

összefüggésre jutunk. Mivel a perturbációs számítás második rendjéig

$$\psi_4(u^*) = \frac{2+N}{12} (u^* K_d) \left[ 1 + \frac{\varepsilon}{2} - \frac{(u^* K_d)}{12} (14+N) \right], \quad (2.52)$$

ezért, (2.46), (2.51) és (2.52) alapján

$$d_{\varphi^2} = d - 2 + \eta + \frac{2+N}{8+N} \varepsilon + \frac{6(2+N)(3+N)}{(8+N)^3} \varepsilon^2. \quad (2.53)$$

$d_{\varphi^2}$ -t felhasználhatjuk a  $\gamma$  kritikus index meghatározásához, ugyanis fennáll a

$$\gamma = \frac{2-\eta}{d-d_{\varphi^2}} \quad (2.54)$$



összefüggés<sup>22</sup>.  $\gamma$ -t,  $\nu$ -höz hasonlóan a Gell—Mann- és Low-féle renormalizációs csoportnak  $k^2=0$  esetben történő felhasználásával is meghatározhatjuk. Míg azonban 2.4-ben  $\nu$ -t a  $\bar{d}$  függvényből, azaz olyan függvényből határoztuk meg, melynek viselkedését a kritikus hőmérséklet felett kellett ismernünk, most  $\gamma$ -t a  $\chi$  függvény kritikus pontbeli viselkedéséből kaptuk meg.

(A  $d_{\varphi^2}$  anomális dimenzió a

$$\chi'_3(x-y) = \sum_{\alpha, \beta} \langle \varphi_\alpha^2(x) \varphi_\beta^2(y) \rangle$$

korrelációs függvényből is meghatározható, de mivel ez a feladat az  $\alpha$  kritikus index meghatározásával kapcsolatos, ezért  $d_{\varphi^2}$  ilyen módon történő kiszámítását a későbbiekre halasztjuk.)

Az A. függelékben látható, hogy a perturbációs számításban fellépő integrálok kiértékelése  $m^2 \neq 0$  esetén sokkal nehezebb, mint az  $m^2=0$  esetben, így, mivel az anomális dimenziókat mindig bizonyos függvények kritikus pontbeli ( $m^2=0$ ) viselkedéséből határozzuk meg, ezért azt mondhatjuk, hogy a kritikus indexek anomális dimenziók segítségével történő kiszámítása nagyon kényelmes módszer.

Második példaként határozzuk meg a  $\Phi$  crossover indexet. Hogy definiálhassuk a crossover indexet, írjunk be az (1.27) Hamilton-operátorba egy, a forgatási szimmetriát elrontó  $\lambda_{\alpha\beta} \varphi_\alpha(x) \varphi_\beta(x)$  ( $\alpha \neq \beta$ ) tagot. A crossover index ezen anizotrop rendszernek izotropba való „átugrását” írja le, vagyis megadja, hogy a kritikus hőmérséklet, a szuszceptibilitás stb. hogyan viselkednek, midőn  $\lambda_{\alpha\beta} \rightarrow 0$ . A  $\Phi$  crossover indexet a

$$\frac{\gamma}{\Phi} = \frac{2-\eta}{d-d_{\varphi\varphi}} \quad (2.55)$$

összefüggésből<sup>23</sup> fogjuk meghatározni, ahol  $d_{\varphi\varphi}$  a  $\varphi_\alpha(x) \varphi_\beta(x)$  tér anomális dimenziója. Vezessük be a

$$\chi_2(x-y) = \langle \varphi_\alpha(x) \varphi_\beta(x) \varphi_\beta(0) \varphi_\alpha(y) \rangle^{24}$$

korrelációs függvényt. Ennek  $\chi_2(k)$  Fourier-transzformáltjára, (2.43) alapján fennáll

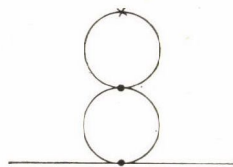
$$\chi_2(k^2, m^2=0) \underset{k \sim 0}{\sim} k^{-2d_\varphi + d_{\varphi\varphi}}. \quad (2.56)$$

A járulékot adó gráfok a következők:

elsőrendben:



másodrendben:



<sup>22</sup> (2.54) bizonyítását lásd a B. függelékben.

<sup>23</sup> (2.55) bizonyításait lásd a C. függelékben.

<sup>24</sup>  $\chi_2$  is amputált függvény.



Most  $x$  a  $\varphi_\alpha \varphi_\beta$  vertexnek felel meg. Feltesszük, hogy a  $(A, u) \rightarrow (\tilde{A}, \tilde{u})$  transzformáció hatására  $\chi_2$  a

$$\chi_2 \left( \frac{k^2}{A^2}, u \right) = z_5 \left( \frac{\tilde{A}^2}{A^2}, u \right) \chi_2 \left( \frac{k^2}{\tilde{A}^2}, \tilde{u} \right) \quad (2.57)$$

módon változik meg. Felírva  $\chi_2$ -re a megfelelő Lie-egyenletet, majd azt ugyanúgy megoldva, mint a korábbiakban kapott Lie-egyenleteket, végül a

$$\psi_5(u^*) = -d_\varphi + \frac{d_{\varphi\varphi}}{2} \quad (2.58)$$

összefüggésre jutunk, ahol

$$\psi_5(u) = \frac{\partial}{\partial \eta} \ln \chi_2(\eta, u)|_{\eta=1}. \quad (2.59)$$

A perturbációs számítás másodrendjéig  $\Psi_5(u^*)$ -t a

$$\psi_5(u^*) = \frac{u^* K_d}{6} \left\{ 1 + \frac{\varepsilon}{2} - \frac{u^* K_d}{6} (7 + N) \right\} \quad (2.60)$$

kifejezés adja meg. Így (2.58) és (2.60)-ból a crossover indexre, egyezésben a más módszerekkel kapott eredményekkel,

$$\Phi = 1 + \varepsilon \frac{N}{2(8+N)} + \varepsilon^2 \frac{N(N^2 + 24N + 68)}{4(8+N)^3} \quad (2.61)$$

adódik.

## 2.6. Az $\alpha$ kritikus index meghatározása

Az  $\alpha$  kritikus indexet az eddig kiszámolt mennyiségek ismeretében kétféle módon is meghatározhatjuk. Vezessük be a

$$\bar{\chi}_3(x-y, m^2) = \sum_{\alpha, \beta} \langle \varphi_\alpha^2(x) \varphi_\beta^2(y) \rangle \quad (2.62)$$

korrelációs függvényt. A  $d_{\varphi^2}$  anomális dimenzió definíciója értelmében  $\bar{\chi}_3$  Fourier-transzformáltjára fennáll a

$$\bar{\chi}_3(k^2, m^2 = 0) \underset{k^2 \sim 0}{\sim} (k^2)^{-\frac{d}{2} + d_{\varphi^2}} \quad (2.63)$$

összefüggés. Ugyanakkor felhasználva a szabadenergiára vonatkozó homogenitási feltételt, (a C. függelékben leírtakhoz teljesen hasonlóan) belátható, hogy


$$\bar{\chi}_3(k^2 = 0, m^2) \underset{m^2 \sim 0}{\sim} (m^2)^{\frac{\alpha - \nu d}{\nu}}. \quad (2.64)$$

A skálatörvények alapján azonban

$$-\frac{\alpha}{\gamma} (2 - \eta) = -d + 2d_{\varphi^2}. \quad (2.65)$$



Mivel a fenti összefüggésben  $\alpha$ -n kívül minden más mennyiség ismert, ezért (2.65)-ből  $\alpha$  meghatározható. Így, mint kezdetben említettük,  $\alpha$ -t kétféleképpen is kiszámíthatjuk: vagy (2.65)-ből, vagy pedig (2.64)-ből. Ha (2.65)-ből akarjuk kiszámítani, akkor  $d_{\varphi^2}$ -t és  $\eta$ -t kell ismernünk, míg ha (2.64)-et használjuk, akkor  $v$  ismeretére van szükségünk és  $\bar{\chi}_3$ -ra kell megfelelő Lie-egyenletet felírunk. Mivel azonban a

$\bar{\chi}_3$  függvényre vonatkozó perturbációs sor a  gráffal kezdődik amiről,

viszont kimutatható, hogy  $m^2 \rightarrow 0$  ( $k^2=0$ ) vagy  $k^2 \rightarrow 0$  ( $m^2=0$ ) esetén divergál, ezért azt találjuk, hogy  $\bar{\chi}_3$ -ra minden további nélkül a multiplikatív renormalizációs csoport nem alkalmazható. Mivel ez a probléma akkor is felmerül, ha akár  $\bar{\chi}_3(k^2=0, m^2)$ -t, akár  $\bar{\chi}_3(k^2, m^2=0)$ -t akarjuk meghatározni, illusztrálásképpen vizsgáljuk meg a  $k^2 \neq 0, m^2=0$  esetet<sup>25</sup>, vagyis  $\alpha$ -t számítsuk ki (2.65) alapján.

Először is egyszerű dimenzióanalízis segítségével könnyen meggyőződhetünk arról, hogy a  $\bar{\chi}_3$  függvény nem dimenziótlan. Ezért vezessük be a

$$\chi'_3(k^2) = \bar{\chi}_3(k^2) \Lambda^\epsilon = \chi'_3 \left( \frac{k^2}{\Lambda^2} = x \right) \quad (2.66)$$

dimenziótlan függvényt. Mint már említettük,  $\chi'_3$ -ra nem alkalmazható a multiplikatív renormalizációs csoport, mivel  $\chi'_3$  már nulladrendben is divergál. Azt, hogy ez a nulladrendben megjelenő divergencia eltűnjön, többféleképpen is elérhetjük. Ha például olyan függvényt vezetünk be, amely (2.66)-ból a nulladrendű járulékkal való leosztás útján adódik, akkor ennek a függvénynek a perturbációs sora természetesen 1-el fog kezdődni. Kimutatható azonban, hogy az így definiált függvénnyel nem lehet elérni azt, hogy a  $(\Lambda, u) \rightarrow (\tilde{\Lambda}, \tilde{u})$  trnszformáció elvégzése után az eredeti és transzformált alak közötti kapcsolatot egy egyszerű,  $\frac{\tilde{\Lambda}^2}{\Lambda^2}$  és  $u$  mennyiségektől függő

állandó biztosítsa. Egy másik lehetőség a nulladrendű divergencia eltüntetésére a nulladrendű járulék szerinti differenciálás. Vagyis vezessük be a következő függvényt:

$$\chi_3(x, u) = \frac{\partial \chi'_3(x, u)}{\partial \chi'^{(0)}_3(x, u)}. \quad (2.67)$$

Itt  $\chi'^{(0)}_3$  a  $\chi'_3$  függvény perturbációs sorának nulladrendű járuléka. Konkrét számolás útján meggyőződhetünk arról, hogy a (2.67) függvénnyel már teljesíthető a

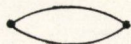
$$\chi_3 \left( \frac{k^2}{\Lambda^2}, u \right) = z_6 \left( \frac{\tilde{\Lambda}^2}{\Lambda^2}, u \right) \chi_3 \left( \frac{k^2}{\tilde{\Lambda}^2}, \tilde{u} \right) \quad (2.68)$$

<sup>25</sup> Ekkor gyakorlatilag ismét a  $d_{\varphi^2}$  anomális dimenziót határozzuk meg. Természetesen az  $\alpha$ -ra vonatkozó direkt számolás is elvégezhető. Ezzel kapcsolatban lásd a [16] hivatkozást.



egyenlet.  $\chi_3$  perturbációs sorának meghatározásához a következő gráfok kiszámítására van szükségünk:

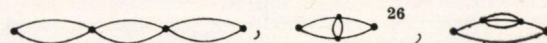
nulladrend:



elsőrend:



másodrend:



Ezen gráfok értékeit lásd az A. függelékben.

Ha (2.68) fennáll, akkor a megfelelő Lie-egyenletet azonnal felírhatjuk és a korábbiakhoz teljesen hasonlóan a

$$\psi_6(u^*) = -\frac{d}{2} + d\varphi^2 + \frac{\varepsilon}{2} \quad (2.67')$$

összefüggésre juthatunk.<sup>27</sup> Itt

$$\psi_6(u) = \frac{\partial}{\partial \eta} \ln \chi_3(\eta, u)|_{\eta=1}. \quad (2.68')$$

Végeredményben az  $\alpha$  kritikus indexre

$$\alpha = \frac{4-N}{2(8+N)} \varepsilon - \frac{(2+N)^2(28+N)}{4(8+N)^2} \varepsilon^2 \quad (2.69)$$

adódik.

## 2.7. Korrekciók a skálatörvényekhez

A 2.2 részben megmutattuk, hogy ha  $x=0$  (vagy  $y=0$ ), akkor az  $u_R$  invariáns töltésre vonatkozó Lie-egyenletnek a (2.13) által megadott  $u^*$  fix pont megoldása van. A kritikus indexeket a megfelelő generátorfüggvények  $u^*$  pontban felvett értékei adják meg, így ha  $u_R = u^*$ , akkor a skálatörvények azonnal adódnak. Ha  $k^2/\Lambda^2$  vagy  $m^2/\Lambda^2$  nagyságrendű korrekciókat is figyelembe veszünk,  $u_R$  nem lesz többé egyenlő  $u^*$ -val. (2.18) alapján

$$u_R(x) - u^* \sim x^{\omega/2} \quad (2.70a)$$

vagy

$$u_R(y) - u^* \sim y^{\omega/2}, \quad (2.70b)$$

ahol  $\omega = 2\Psi'_1$ .  $\Psi_1$  ismeretében  $\omega$  kiszámítható és azt kapjuk, hogy

$$\omega = \varepsilon - \frac{3(3N+14)}{(8+N)^2} \varepsilon^2. \quad (2.71)$$

<sup>26</sup> Ennek a gráfnak a kiszámítása viszonylag bonyolult, ezért a számolás menetét az A. függelékben részletesen ismertetjük.

<sup>27</sup> Az  $\frac{\varepsilon}{2}$  tag megjelenésének oka az, hogy  $\bar{\chi}_3^{(0)} \sim k^{-\varepsilon}$  ezért a  $\bar{\chi}_3^{(0)}$  szerinti differenciálás megváltoztatja a (2.63) aszimptotikus alakot.



A skálatörvényekhez adódó korrekciókat úgy határozhatjuk meg, hogy a korábbiakban előfordult valamennyi korrelációs függvényre vonatkozó Lie-egyenletbe  $u_R = u^*$  helyett a (2.18) kifejezést írjuk.

Nézzük meg, hogy mit jelent ez például a spin-spin korrelációs függvény esetén. (2.21)-ben a jobboldalon  $u_R$  helyébe a (2.18) megoldást kell behelyettesítenünk. Elvégezve az integrálást, végül is azt kapjuk, hogy

$$d(x) \sim x^{\frac{\eta}{2}} \left[ 1 + C_1 x^{\frac{\omega}{2}} \right], \quad \left( x = \frac{k^2}{\Lambda^2} \right), \quad (2.72a)$$

illetve

$$d(y) \sim y^{\frac{\eta}{2}} \left[ 1 + C_2 y^{\frac{\omega}{2}} \right], \quad \left( y = \frac{m^2}{\Lambda^2} \right). \quad (2.72b)$$

Fentikeket  $k$ -val és  $m$ -mel kifejezve,

$$d(k^2) \sim k^{\eta} [1 + C'_1 k^{\omega}], \quad (C_{\perp} = C'_1 \Lambda^{-\omega}),$$

$$d(m^2) \sim m^{-\frac{\gamma}{\nu}} [1 + C'_2 m^{\omega}], \quad (C_2 = C'_2 \Lambda^{-\omega}). \quad (2.73a)$$

Másrészt, mivel  $\frac{d(m^2)}{m^2} = \chi$  (szuszeptibilitás), és  $m \sim t^{\nu}$ , ezért

$$\chi \sim t^{-\gamma} [1 + C_3 t^{\omega\nu}]. \quad (2.74)$$

Teljesen hasonló módon lehet megkapni a dolgozatban előforduló valamennyi korrelációs függvény megfelelő korrekcióját. Belátható, hogy az  $\omega$  index univerzális, de ugyanezt a  $C_i$  állandókról már nem lehet elmondani.

### Összefoglalás

A dolgozatban a Gell—Mann- és Low-féle renormalizációs csoport egy módosított változatát dolgoztuk ki. Az eljárás egyesíti a Kadanoff—Wilson-hosszskálázás szemléletes fizikai képét a multiplikatív renormalizációs csoport Lie-egyenleteinek egyszerű matematikai struktúrájával.

Míg a Wilson-féle eljárásban a kritikus indexet a fix pont körül linearizált renormalizációs operátor sajátértékei határozzák meg, az általunk ismertetett módszerben ezeket a különböző korrelációs függvényekhez tartozó generátorfüggvények adják meg. Az új módszer alapját olyan transzformációs egyenletek képezik, melyek érvényességét általánosan bizonyítani nem tudjuk, de az eddigi alkalmazások esetében (lásd Kondo-probléma [35], egydimenziós Fermi-gáz [34], kritikus jelenségek [16]) ezen egyenletek fennállását perturbatív úton mindig igazolni lehetett. Így, ellentétben a Gell—Mann- és Low-féle eljárás eredeti verziójával, a perturbációs sorokra való ránézésből semmiféle invarianciatulajdonságot igazolni nem tudunk, ugyanakkor azonban az eredeti eljárásban fellépő önkényes normálási impulzus helyett most a fizikai tartalommal bíró levágási impulzus jelenik meg.



A skálatörvényekhez adódó korrekciókat rendkívül egyszerű módon kaphatjuk meg. A magasabbrendű korrekciók ( $x$ -ben vagy  $y$ -ban elsőrendűnél magasabbak) elvben szintén meghatározhatók.

Az eljárás „teljesen szimmetrikus” az  $x, y$  változókban, ami azt jelenti, hogy az invariáns töltés fix pontjára a különböző határesetekben ugyanazt az értéket kapjuk és a Green-függvény és vertex-függvény transzformációs viselkedését, függetlenül attól, hogy az impulzust vagy a hőmérsékletet skálázzuk, ugyanazok a  $z_i$   $\left(\frac{\tilde{\lambda}^2}{\lambda^2}$ -től és  $u$ -tól függő) állandók adják meg. Ez egyben azt is mutatja, hogy az eljárásban a tömeghéjon való tömegrenormalizálás természetes követelményként jelentkezik. (Ha ugyanis például a Green-függvényben a levonást a  $k^2 = -m^2$  pont helyett a  $k^2 = 0$  pontban végezzük el, akkor az invariáns töltés fenti szimmetriáját nem tudjuk igazolni.)

Kíváncsú lenne a különböző együttthatófüggvények meghatározása, ami azonban azt jelentené, hogy a fellépő korrelációs függvényeket, mint  $x$  és  $y$  kétváltozós függvényeit kéne kiszámítanunk. Ezt a feladatot a fellépő rendkívül bonyolult integrálok miatt mindeztideig nem végeztük el.

Az eljárás kiterjeszthető arra az esetre is, amikor két különböző csatolási állandót veszünk figyelembe a Hamilton-operátorban. Így például a köbös anizotrópia konzisztensen tárgyalható.

Végeredményben tehát azt mondhatjuk, hogy a  $T_c$  kritikus hőmérséklet felett ezen eljárás segítségével mindent ki tudunk számítani.

Egy következő feladat lenne a  $T_c$  alatti szimmetriasértő fázis vizsgálata, valamint az állapotegyenlet meghatározása.

Mivel a legutóbbi időben a CS egyenletet Brezin [20d] és munkatársai sikeresen alkalmazták a dinamikus jelenségek leírására, ezért megvan a remény, hogy az itt ismertetett eljárás is kiterjeszthető a dinamikára. Ezek a feladatok azonban egy teljesen önálló dolgozat témáját képezhetik.

## KÖSZÖNETNYILVÁNÍTÁS

Köszönetemet fejezem ki témavezetőmnek, Dr. Solyom Jenőnek azért az állandó együttműködésért és segítségért, amely lehetővé tette eme dolgozat sikeres megírását.

Ugyancsak köszönetemet fejezem ki Dr. Zawadowski Alfrédnek a téma felvetésért és hasznos tanácsaiért.

Külön köszönet illeti Benke Emiliát a kézirat elkészítéséért.

## A. függelék

Ezen függelék első részében megadjuk a dolgozatban előforduló valamennyi gráf járulékát a megfelelő kombinatorikai faktorial, a második részben pedig néhány tipikus integrál kiszámítását részletezzük.

$$\text{Sajátenergia: } \left( x = \frac{k^2}{\lambda^2}, y = \frac{m^2}{\lambda^2} \right)$$



$$\text{---} \bigcirc \text{---} \bigcirc \text{---} \quad \begin{matrix} k^2=0 \\ m^2 \neq 0 \end{matrix} - \begin{matrix} k^2=0 \\ m^2=0 \end{matrix} = \frac{2+N}{6} \left\{ \frac{uK_d}{2} m^2 \left[ \ln y - \frac{\varepsilon}{4} \ln^2 y \right] \right\}, \quad (\text{A.1})$$

$$\text{---} \bigcirc \text{---} \bigcirc \text{---} \quad \begin{matrix} k^2 \neq 0 \\ m^2=0 \end{matrix} - \begin{matrix} k^2=0 \\ m^2=0 \end{matrix} = \frac{2+N}{18} \left\{ \frac{(uK_d)^2}{8} k^2 \left[ \left(1 + \frac{9\varepsilon}{4}\right) \ln x - \frac{5}{2} \right] \right\}, \quad (\text{A.2})$$

$$\text{---} \bigcirc \text{---} \bigcirc \text{---} \quad \begin{matrix} k^2=0 \\ m^2 \neq 0 \end{matrix} - \begin{matrix} k^2=0 \\ m^2=0 \end{matrix} = \frac{2+N}{18} \left\{ \frac{(uK_d)^2}{8} m^2 \left[ -3 \ln^2 y + 5 \ln y \right] \right\}, \quad (\text{A.3})$$

$$\text{---} \bigcirc \text{---} \bigcirc \text{---} \quad \begin{matrix} k^2 \neq 0 \\ m^2=0 \end{matrix} - \begin{matrix} k^2=0 \\ m^2=0 \end{matrix} = \frac{(8+N)(2+N)}{108} \left\{ \frac{(uK_d)^3}{16} k^2 \left[ -\ln^2 x + 5 \ln x \right] \right\}. \quad (\text{A.4})$$

Vertex:

$$\text{---} \bigcirc \text{---} \bigcirc \text{---} \quad \begin{matrix} k^2 \neq 0 \\ m^2=0 \end{matrix} = \frac{8+N}{6} \left\{ -\frac{uK_d}{2} \left[ \left(1 + \frac{\varepsilon}{2}\right) \ln x - \frac{\varepsilon}{4} \ln^2 x - 1 \right] \right\}, \quad (\text{A.5})$$

$$\text{---} \bigcirc \text{---} \bigcirc \text{---} \quad \begin{matrix} k^2=0 \\ m^2 \neq 0 \end{matrix} = \frac{8+N}{6} \left\{ -\frac{uK_d}{2} \left[ \left(1 - \frac{\varepsilon}{2}\right) \ln y - \frac{\varepsilon}{4} \ln^2 y + 1 \right] \right\}, \quad (\text{A.6})$$

$$\text{---} \bigcirc \text{---} \bigcirc \text{---} \quad \begin{matrix} k^2 \neq 0 \\ m^2=0 \end{matrix} = \frac{N^2+6N+20}{36} \left\{ \frac{(uK_d)^2}{4} \left[ -2 \ln x + \ln^2 x + 1 \right] \right\}, \quad (\text{A.7})$$

$$\text{---} \bigcirc \text{---} \bigcirc \text{---} \quad \begin{matrix} k^2=0 \\ m^2 \neq 0 \end{matrix} = \frac{N^2+6N+20}{36} \left\{ \frac{(uK_d)^2}{4} \left[ 2 \ln y + \ln^2 y + 1 \right] \right\}, \quad (\text{A.8})$$

$$\text{---} \bigcirc \text{---} \bigcirc \text{---} \quad \begin{matrix} k^2 \neq 0 \\ m^2=0 \end{matrix} = \frac{5N+22}{9} \left\{ -\frac{(uK_d)^2}{16} \left[ -\ln^2 x + 5 \ln x \right] \right\}, \quad (\text{A.9})$$

$$\text{---} \bigcirc \text{---} \bigcirc \text{---} \quad \begin{matrix} k^2=0 \\ m^2 \neq 0 \end{matrix} = \frac{5N+22}{9} \left\{ \frac{(uK_d)^2}{8} \ln^2 y \right\}. \quad (\text{A.10})$$

A különböző korrelációs függvényekben fellépő gráfok: (mindenhol  $k^2 \neq 0$ ,  $m^2=0$ )


$$\text{---} \bigcirc \text{---} \quad (\text{nullarend}) = 2N \left\{ -\frac{K_d}{2} \left[ \left(1 + \frac{\varepsilon}{2}\right) \ln x - \frac{\varepsilon}{4} \ln^2 x - 1 \right] \right\}, \quad (\text{A.11})$$

$$\text{---} \bigcirc \text{---} \quad (\text{elsőrend}) = \frac{N(N+2)}{3} \left\{ \frac{uK_d^2}{4} \left[ -(2+\varepsilon) \ln x + \left(1 + \frac{3}{2}\varepsilon\right) \ln^2 x - \frac{\varepsilon}{2} \ln^3 x + 1 \right] \right\}, \quad (\text{A.12})$$

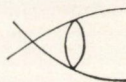
$$\text{---} \bigcirc \text{---} \quad (\text{másodrend}) = \frac{N(N+2)^2}{18} \left\{ -\frac{u^2 K_d^3}{8} \left[ \ln^3 x - 3 \ln^2 x + 3 \ln x - 1 \right] \right\}, \quad (\text{A.13})$$

$$\text{---} \bigcirc \text{---} \quad (\text{másodrend}) = \frac{2N(N+2)}{9} \left\{ -\frac{u^2 K_d^3}{32} \left[ \ln^2 x - 7 \ln x + 7 \right] \right\}, \quad (\text{A.14})$$





$$(\text{másodrend}) = \frac{N(N+2)}{3} \left\{ \frac{u^2 K_d^3}{2} \left[ -\frac{1}{12} \ln^2 x + \frac{1}{2} \ln^2 x - \ln x \right] \right\} \quad (\text{A.15})$$

Ezen függelék hátralevő részében két, a dolgozatban előforduló tipikus gráf kiszámítását vázoljuk. Először tekintjük a  másodrendű vertexkorrekciónak megfelelő integrált  $k^2=0$ ,  $m^2 \neq 0$  esetben. Számítandó a

$$\iint \frac{d^4 p_1 d^4 p_2}{(2\pi)^8} \frac{1}{(p_1^2 + m^2)^2} \frac{1}{(p_2^2 + m^2)} \frac{1}{[(p_1 + p_2)^2 + m^2]} \quad (\text{A.16})$$

integrál  $d=4$  dimenzióban. A szögintegrál elvégzése után a

$$\frac{K_4^2}{2} \int_0^A \int_0^A \frac{dp_1 dp_2 p_1 p_2}{(p_1^2 + m^2)^2 (p_2^2 + m^2)} [p_1^2 + p_2^2 + m^2 - \{(p_1^2 + p_2^2 + m^2)^2 - 4p_1^2 p_2^2\}^{1/2}] \quad (\text{A.17})$$

kifejezéshez jutunk. Bevezetve a

$$z = \frac{p_1^2}{m^2} \quad \text{és} \quad \omega = \frac{p_2^2}{m^2}$$

változókat, (A.17) a

$$\frac{K_4^2}{8} \int_0^A \int_0^A \frac{dz d\omega}{(z+1)^2 (\omega+1)} [z + \omega + 1 - \{(z + \omega + 1)^2 - 4z\omega\}^{1/2}] \quad (\text{A.18})$$

alakba írható át. Itt  $A = \frac{A^2}{m^2} \gg 1$ . Jelöljük (A.18)-at  $\Pi(A)$ -val és differenciáljuk  $\Pi(A)$ -t  $A$  szerint. Ekkor

$$\begin{aligned} \frac{d\Pi}{dA} &= \frac{1}{A+1} \int_0^A \frac{dz}{(z+1)^2} [z+1 - \{(z+1+A)^2 - 4zA\}^{1/2} + A] + \\ &+ \frac{1}{(A+1)^2} \int_0^A \frac{d\omega}{\omega+1} [\omega+1 - \{(\omega+1+A)^2 - 4\omega A\}^{1/2} + A]. \end{aligned} \quad (\text{A.19})$$

A fellépő integrálok egzaktul számíthatók és végeredményben

$$\begin{aligned} \frac{d\Pi}{dA} &= \frac{K_4^2}{8} \left[ \frac{\ln(A+1)}{A+1} + \frac{A \ln(A+1)}{(A+1)^2} - \frac{1}{(A+1)^2} \ln \left[ \frac{(1+4A)^{1/2} + 1}{2} \right] \right] + \\ &+ \frac{3A}{(A+1)^2 [A(A+4)]^{1/2}} \ln \left\{ \frac{[A(A+4)]^{1/2} (1+4A)^{1/2} + 3A}{[A(A+4)]^{1/2} (1+A) + 3A + A^2} \right\} - \\ &- \frac{3A}{(A+1)^2 [A(A+4)]^{1/2}} \ln(A+1). \end{aligned} \quad (\text{A.20})$$


Fejtsük sorba a fenti kifejezést  $\frac{1}{A}$  szerint és csak azokat a tagokat hagyjuk meg, melyek  $A$  szerinti integrálás után divergens járulékot adhatnak. Így

$$\frac{d\Pi}{dA} = \frac{K_4^2}{4} \frac{\ln A}{A}. \quad (\text{A.21})$$

Ezt  $A$  szerint integrálva és figyelembe véve, hogy a  $y = \frac{m^2}{A^2}$ , végülis (nagy  $A$ -ra)

$$\Pi = \frac{K_4^2}{8} \ln^2 y \quad (\text{A.22})$$

adódik.

Következő példaként számítsuk ki a  gráfnak megfelelő járulékot a  $k^2 \neq 0$ ,  $m^2 = 0$  esetben ( $d=4$ ). Ekkor számítandó az

$$I(k^2) = \int \frac{d^4 q}{(2\pi)^4} T^2(\mathbf{q}, \mathbf{k}) \quad (\text{A.23})$$

integrál, ahol

$$T(\mathbf{k}, \mathbf{q}) = \int \frac{d^4 p}{(2\pi)^4} \frac{1}{p^2(p+k)^2(p+q)^2}. \quad (\text{A.24})$$

Vegyük észre, hogy nagy  $p$ -re,  $T \sim p^{-2}$  és ezért (A.24)-ben az abszolút érték szerinti integrálás felső határát  $\infty$ -el helyettesíthetjük. Vezessük be a

$$\mathbf{q} = \mathbf{q}' |\mathbf{k}|,$$

valamint a

$$\mathbf{p}_1 = \mathbf{p}'_1 |\mathbf{k}|$$

$$\mathbf{p}_2 = \mathbf{p}'_2 |\mathbf{k}|$$

új integrálási változókat. Ekkor

$$I = \int \frac{d^4 q}{(2\pi)^4} T(\mathbf{1}, \mathbf{q}), \quad (\text{A.25})$$

ahol az abszolút érték szerinti integrálás felső határa most  $\frac{A}{k}$ . Ezek után számítsuk ki  $T(\mathbf{1}, \mathbf{q})$ -t.

$$T(\mathbf{1}, \mathbf{q}) = \int_0^{\frac{A}{k}} \frac{dp \cdot p}{(2\pi)^4} \int d\Omega \frac{1}{p^2 + 1 + 2p \cos \theta} \frac{1}{p^2 + q^2 + 2pq \cos \Phi}. \quad (\text{A.26})$$



Itt  $\int d\Omega$  a  $\mathbf{p}$  irányára történő integrálást jelenti és

$$\cos \theta = \left( \mathbf{1}, \frac{\mathbf{p}}{|\mathbf{p}|} \right), \quad (\text{A.27a})$$

$$\cos \Phi = \left( \frac{\mathbf{p}}{|\mathbf{p}|}, \frac{\mathbf{q}}{|\mathbf{q}|} \right). \quad (\text{A.27b})$$

Egyébként a négydimenziós térben az egyszerű térfogatintegrált a

$$\int d^4x = \int_0^r \int_0^\pi \int_0^\pi \int_0^{2\pi} x^3 \sin^2 \vartheta_1 \sin \vartheta_2 dx d\vartheta_1 d\vartheta_2 d\varphi \quad (\text{A.28})$$

alakban írhatjuk fel.

Ha (A. 26)-ban a négydimenziós koordináta-rendszer  $z$ -tengelyét az  $\mathbf{1}$  vektor irányával párhuzamosnak választjuk, akkor  $\theta = \vartheta_1$ , míg ha a  $z$ -tengelyt  $\mathbf{q}$  irányába vesszük fel, akkor  $\Phi = \vartheta_2$ . Az integrálás elvégzéséhez valamelyik lehetőséget kell kiválasztanunk, de ez azt jelenti, hogy ha például  $\mathbf{1}$ -et választjuk  $z$ -tengelynek, akkor  $\Phi$ -t már csak az összes többi polárszög segítségével tudjuk felírni. Ez nyilvánvalóan azt jelenti, hogy  $\Phi$  szerint nem tudunk kiintegrálni.

Ehelyett vegyük  $T(\mathbf{1}, \mathbf{q})$   $q$  szerinti Mellin-transzformáltját. A Mellin-transzformációt a következő összefüggések definiálják:

$$g(s) = \int_0^\infty dx f(x) x^{s-1}, \quad (\text{A.29a})$$

$$f(x) = \frac{1}{2\pi i} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} ds x^{-s} g(s). \quad (\text{A.29b})$$

Ezt felhasználva  $T(\mathbf{1}, s)/T(\mathbf{1}, \mathbf{q})$  Mellin-transzformáltja a

$$T(\mathbf{1}, s) = \int_0^{\frac{\Lambda}{k}} \frac{dp \cdot p}{(2\pi)^4} \int d\Omega \frac{1}{p^2 + 1 + 2p \cos \theta} \int_0^\infty \frac{dq \cdot q^{s-1}}{p^2 + q^2 + 2pq \cos \Phi} \quad (\text{A.30})$$

alakba írható. A  $q$  szerinti integrálás elvégezhető és így

$$T(\mathbf{1}, s) = -\pi \frac{(2\pi)^{-4}}{\sin(\pi s)} \int d\Omega \frac{\sin[(s-1)\Phi]}{\sin \Phi} \int_0^{\frac{\Lambda}{k}} \frac{dp \cdot p^{s-1}}{p^2 + 1 + 2p \cos \theta}. \quad (\text{A.31})$$

Mint már említettük,  $T(p) \sim p^{-2}$  nagy  $p$ -re, ezért az (A.31)-ben fellépő  $p$  szerinti integrál felső határa  $\infty$ -el helyettesíthető. Így azonban az (A.30)-ban szereplő  $q$  szerinti integrálhoz hasonlót kapunk.

Végül is tehát

$$T(\mathbf{1}, s) = \frac{\pi^2}{(2\pi)^4 \sin^2(\pi s)} \int d\Omega \frac{\sin[(s-1)\Phi] \sin[(s-1)\theta]}{\sin \Phi \sin \theta}. \quad (\text{A.32})$$



Ezután transzformáljunk vissza:

$$T(1, q) = \frac{\pi^2}{(2\pi i)(2\pi)^4} \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} ds q^{-s} \frac{1}{\sin^2(\pi s)} \times \\ \times \int d\Omega \frac{\sin[(s-1)\Phi] \sin[(s-1)\theta]}{\sin \Phi \sin \theta}. \quad (\text{A.33})$$

Mivel azonban a korábban megjelent ( $q$  és  $p$  szerinti) integrálokra fennállt

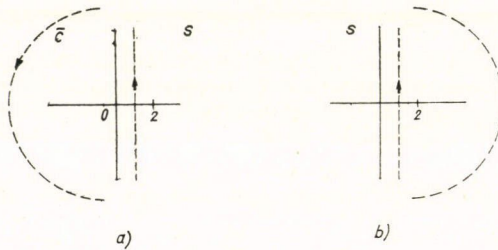
$$\int_0^\infty \frac{dq q^{s-1}}{p^2 + q^2 + 2pq \cos \Phi} = -\pi \frac{\sin[(s-1)\Phi] \cdot p^{s-1}}{\sin(\pi s) \sin \Phi}, \\ |\Phi| < \pi; \quad 0 < \text{Re}(s) < 2, \quad (\text{A.34})$$

ezért az (A.33) kifejezés csak  $0 < c < 2$  esetében érvényes. Ahhoz, hogy (A.33)-at ki tudjuk számítani, a kontúrt ügyesen kell megválasztanunk. Vegyük figyelembe azt, hogy (A.33)-at majd még négyzetre kell emelnünk és  $|q|$  szerint integrálnunk kell.

A  $|q|$  szerinti integrálás 0-tól  $\frac{A}{k}$ -ig megy. (Itt már természetesen meg kell hagynunk a véges felső határt.) Mindezeket szem előtt tartva, a  $\left(0, \frac{A}{k}\right)$   $|q|$  szerinti integrációs tartományt osszuk két részre:

$$\int_0^{\frac{A}{k}} \dots dq = \int_0^1 + \int_1^{\frac{A}{k}}.$$

Az első integrálban  $q < 1$  és így ott a kontúrt balra zárjuk le (lásd az a. ábrát), ami azt jelenti, hogy



$$q < 1, \quad \int_{c-i\infty}^{c+i\infty} + \int_{\bar{c}} = 2\pi i \sum \text{Rez.}$$

Mivel  $q < 1$ , ezért  $\bar{C}$ -re vett integrál értéke zérus. Ha  $q > 1$ , akkor a kontúrt a b. ábra szerint zárjuk le és a fentiekhez hasonló okok miatt ismét csak a reziduumok járulékát kell megtartanunk. (A. 33)-ból látszik, hogy  $T(1, q)$ -hoz azok a pontok

adnak járulékok, melyekben  $\sin(\pi s)=0$ , vagyis

(a. esetben)  $s=0, -1, -2, -3, \dots$

(b. esetben)  $s=0, 1, 2, 3, \dots$

Mivel azonban  $c>0$ , ezért a b. esetben az  $s=0$  pont nem tartozik az integrálási tartományhoz. Másrészt  $s=1$  esetén (A.33) számlálója is zérus és ezért az integrandusnak nincs szingularitása.

Először vizsgáljuk a b. esetet. Ekkor az első lényeges járulékok az  $s=2$  pont adja. Az integrandusnak ebben a pontban kétszeres pólusa van. A kétszeres pólus rezidiumának kiszámítására vonatkozó szabályok értelmében, végül is az  $s=2$  pontban a rezidium

$$\text{Rez}(s=2) = q^{-2} \cdot 2\pi^2(\ln q + 1). \quad (\text{A.35})$$

Ez az a kifejezés, amit négyzetre kell emelnünk (miután beszoroztuk  $(2\pi)^{-4}$ -el) és be kell írunk (A.23)-ba. Elvégezve a  $q$  szerinti integrálást az  $I(k^2)$ -hez adódó megfelelő járulék

$$K_4^3 \left[ \frac{\ln^3 q}{3} + \ln^2 q + \ln q \right]_1^{\frac{A}{k}}. \quad (\text{A.36})$$

Ezek után vizsgáljuk meg az a. ábrának megfelelő esetet. Most az első lényeges járulékok az  $s=0$  pont adja. A megfelelő rezidium

$$-2\pi^2(\ln q + 1). \quad (\text{A.37})$$

Az  $I(k^2)$ -hez adódó járulék (mivel 0-tól 1-ig kell  $q$  szerint integrálni), ilyenkor véges, amit (A.36) mellett elhanyagolhatunk. Nézzük az  $s=3$  pont járulékát. Könnyen kimutatható, hogy innen sem  $m$ -es, sem  $m^2$ -s tagot nem kapunk. Végeredményben tehát

$$I(x) = \frac{K_4^3}{2} \left[ -\frac{1}{12} \ln^3 x + \frac{1}{2} \ln^2 x - \ln x \right], \quad (\text{A.38})$$

ahol

$$x = \frac{k^2}{A^2}.$$

## B. függelék

Definíció:

$$B = \int \varphi(x) d^d x,$$

$$\overline{B^2} = \int \Gamma^2(x-y) d^d x d^d y = \int \langle \varphi(x) \varphi(y) \rangle d^d x d^d y. \quad (\text{B.1})$$

Definíció:

$$\ll B^n \gg = \frac{\partial^n}{\partial \lambda^n} \ln \langle e^{\lambda B} \rangle|_{\lambda=0}. \quad (\text{B.2})$$

$\ll B^n \gg$  az  $\frac{1}{z} e^{-\mathcal{H}}$  valószínűségeloszlás  $n$ -dik logaritmikusan momentuma.  $\mathcal{H}$  az (1.27)-el definiált Hamiltonián,  $z$  pedig az ezen  $\mathcal{H}$ -hoz tartozó állapotösszeg.



Definíció:

$$Q_{\varphi, n}(x_1, \dots, x_n) = \frac{\delta^n}{\delta \lambda(x_1) \dots \delta \lambda(x_n)} \ln \langle \exp \int \lambda(x) \varphi(x) d^d x \rangle|_{\lambda(x_i=0)}. \quad (\text{B.3})$$

Nyilvánvalóan fennáll<sup>28</sup>

$$\ll B^n \gg = \int Q_{\varphi, n}(x_1, \dots, x_n) d^d x_1 \dots d^d x_n. \quad (\text{B.4})$$

Másrészt  $Q_{\varphi, n}$  éppen az  $n$ -részecskés korrelációs függvény. Felhasználva a [9c]

$$\Gamma_{\varphi}^{(n)}(k_1, \dots, k_n, T) = Q_{\varphi, n} \Big|_{\substack{k_i \ll \Lambda \\ T \sim T_c}} = \xi^{(n-1)d - d\varphi n} F(\xi k_1, \dots, \xi k_n) \quad (\text{B.5})$$

összefüggést, ((B. 4)-ből és (B. 5)-ből azt kapjuk, hogy

$$\ll B^{2n} \gg = \int \Gamma_{\varphi}^{(2n)}(x_1 \dots x_n) d^d x_1 \dots d^d x_n = \text{const.} \cdot \xi^{(2n-1)d - 2nd\varphi}. \quad (\text{B.6})$$

Itt  $\xi$  a koherencia hossz. Térelméleti nyelven  $\xi$  a fizikai tömeg inverze. Az (1.27) Hamilton-operátorhoz tartozó  $z$  állapotösszeg

$$z \sim \int \mathfrak{g}\{\varphi\} \exp \left\{ -\frac{1}{2} \int d^d x \left[ \sum_{i=1}^d (\partial_i \varphi)^2 + m_0^2 \varphi^2 + \frac{\lambda}{4!} \varphi^4(x) \right] \right\}. \quad (\text{B.7})$$

Itt a  $\mathfrak{g}\{\varphi\}$  szimbólum funkcionál integrálást jelent.<sup>29</sup> Ezek után a fentiekben elmondottakat alkalmazzuk  $\varphi^2$ -re. Ekkor

$$\begin{aligned} B &= \int \varphi^2(x) d^d x, \\ \ll B^2 \gg &= \frac{\partial^{2n}}{\partial \eta^{2n}} \ln \int \mathfrak{g}\{\varphi\} \exp \left[ -\frac{1}{2} \int d^d x \left[ \sum (\partial_i \varphi)^2 + m_0^2 \varphi^2 + \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \frac{\lambda}{4!} \varphi^4 \right] \right] + \eta \int \varphi^2 d^d x \Big] = \text{const.} \cdot \frac{\partial^{2n}}{\partial m_0^{2n}} \ln \int \mathfrak{g}\{\varphi\} \exp [\dots]. \end{aligned} \quad (\text{B.8})$$

(B. 8)-ból következik, hogy

$$\ll B^{2n+2} \gg = \text{const.} \cdot \frac{\partial^2}{\partial (m_0^2)^2} \ll B^{2n} \gg. \quad (\text{B.9})$$

Felhasználva (A. 7)-et és (A. 9)-et, azt kapjuk, hogy

$$\frac{d}{d(m_0^2)^2} \xi^{(2n-1)d - 2nd\varphi^2} = \text{const.} \cdot \xi^{(2n+2-1)d - (2n+2)d\varphi^2}. \quad (\text{B.10})$$

Az (A. 10) differenciálegyenlet megoldása<sup>30</sup>

$$\xi(m_0^2) = \xi(t) = \xi_0 t^{-\frac{1}{d-d\varphi^2}}, \quad (\text{B.12})$$

ahol

$$t = T - T_c.$$

<sup>28</sup> Az egész számítás során  $T > T_c$ , ezért  $\langle \varphi \rangle = 0$ .

<sup>29</sup> Legyen  $N=1$ .

<sup>30</sup> Korábbiakból tudjuk, hogy  $m_0$  kifejezhető  $t$ -vel.

Mivel a  $v$  index definíciója

$$\xi(t) \underset{t \rightarrow 0}{\sim} t^{-v}, \quad (\text{B.12})$$

ezért (A. 11)-ből

$$v = \frac{1}{d-d_{\varphi^2}} \quad (\text{B.13})$$

adódik. Felhasználva a

$$2-\eta = \frac{\gamma}{v} \quad (\text{B.14})$$

skálatörvényt, végeredményben azt kapjuk, hogy

$$\gamma = (2-\eta)v = \frac{2-\eta}{d-d_{\varphi^2}}. \quad (\text{B.15})$$

Ez az, amit bizonyítanunk kellett.

### C. függelék

Induljunk ki a

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2} \sum_{\ell=1}^{\mathcal{N}} \left[ \sum_{i=1}^d (\partial_i \varphi_{\ell})^2 + m_0^2 (\varphi_{\ell})^2 \right] + \frac{uA^2}{4!} [\vec{\varphi}^2] + \lambda_{\alpha\beta} \varphi_{\alpha} \varphi_{\beta} - h_{\alpha} \varphi_{\alpha} - h_{\beta} \varphi_{\beta} \quad (\text{C.1})$$

Hamiltoniánból. Az  $F$  szabadenergiára vonatkozó homogenitási hipotézis az

$$F(\tau l, k_{\alpha} l^{\mu}, h_{\beta} l^{\mu}, \lambda_{\alpha\beta} l^{\Phi}) = l^{-\gamma+2\mu} F(\tau, h_{\alpha}, h_{\beta}, \lambda_{\alpha\beta}) \quad (\text{C.1})$$

alakba írható, ahol  $\tau = \frac{T-T_c(\lambda_{\alpha\beta})}{T_c(0)}$ ,  $h_{\alpha}$  és  $h_{\beta}$  pedig a külső mágneses tér megfelelő komponensei. Differenciáljuk  $F$ -et  $h_{\alpha}$  és  $h_{\beta}$ , majd pedig  $\lambda_{\alpha\beta}$  szerint és jelöljük a háromszoros deriváltat  $F'''$ -al. Ekkor (C.1)-ből

$$F'''(\tau l, h_{\alpha} l^{\mu}, h_{\beta} l^{\mu}, \lambda_{\alpha\beta} l^{\Phi}) = l^{-\gamma-\Phi} F'''(\tau, h_{\alpha}, h_{\beta}, \lambda_{\alpha\beta}). \quad (\text{C.2})$$

Felhasználva az

$$F = -kT \log Z \quad \text{és} \quad Z = \sum e^{-\mathcal{H}} \quad (\text{C.3})$$

összefüggéseket, (C. 2)-ből

$$\begin{aligned} l^{\gamma+\Phi} \int d^d x d^d y f(x, y; \tau l, k_{\alpha} l^{\mu}, h_{\beta} l^{\mu}, \lambda_{\alpha\beta} l^{\Phi}) = \\ = \int d^d x d^d y f(x, y; \tau, h_{\alpha}, h_{\beta}, \lambda_{\alpha\beta}) \end{aligned} \quad (\text{C.4})$$

adódik, ahol

$$f(x, y; \tau, h_{\alpha}, h_{\beta}, \lambda_{\alpha\beta}) = \langle \varphi_{\alpha}(x) \varphi_{\beta}(x) \varphi_{\beta}(y) \varphi_{\alpha}(0) \rangle_{\mathcal{H}} \quad (\text{C.5})$$

Itt az  $\mathcal{H}$  index azt jelenti, hogy az átlagképzést a (C.1) Hamilton-operátorral kell elvégezni.



Fourier transzformálva (C.4)-et és figyelembe véve, hogy  $f$  csak az  $(x-y)$  különbségtől függ (a translációs invariancia miatt), az  $f$  korrelációs függvényre vonatkozó homogenitási feltevés az

$$l^{\gamma+\Phi} f(kl^\nu; \tau l, h_\alpha l^\mu, h_\beta l^\mu, \lambda_{\alpha\beta} l^\Phi) = f(k; \tau, h_\alpha, h_\beta, \lambda_{\alpha\beta}) \quad (\text{C.6})$$

alakba írható.

Legyen  $l = k^{-\frac{1}{\nu}}$  és  $\tau = k_\alpha = k_\beta = \lambda_{\alpha\beta} = 0$ . Ekkor

$$k^{-\frac{\gamma+\Phi}{\nu}} f(1) = f(k). \quad (\text{C.7})$$

(2.43) alapján tudjuk, hogy a kritikus pontban

$$f(k) \sim k^{-2d+d_{\varphi\varphi}+d-2+\eta}. \quad (\text{C.8})$$

Így végeredményben a

$$-\frac{\gamma+\Phi}{\nu} = -2d+d_{\varphi\varphi}+d-2+\eta \quad (\text{C.9})$$

összefüggésre jutunk. Felhasználva a

$$(2-\eta)\nu = \gamma \quad (\text{C.10})$$

skálatörvényt, (C.9)-ből

$$\frac{\gamma}{\Phi} = \frac{2-\eta}{d-d_{\varphi\varphi}}, \quad (\text{C.11})$$

vagyis a kívánt reláció adódik.

#### D. függelék

$$\begin{aligned} z_1 = z'_1 = 1 + (uK_d)^2 \frac{2+N}{144} \left[ 1 - \frac{\varepsilon}{4} \right] \ln t + \\ + (uK_d)^3 \frac{(2+N)(8+N)}{108 \cdot 16} \ln^2 t, \end{aligned} \quad (\text{D.1})$$

$$\begin{aligned} z_2 = z'_2 = 1 + (uK_d) \frac{8+N}{12} \left[ \ln t - \frac{\varepsilon}{4} \ln^2 t \right] + \\ + (uK_d)^2 \left[ -\frac{5N+22}{36} \ln t + \frac{(8+N)^2}{144} \ln^2 t \right], \end{aligned} \quad (\text{D.2})$$

$$\begin{aligned} z_3 = 1 - (uK_d) \frac{2+N}{12} \left[ \ln t - \frac{\varepsilon}{4} \ln^2 t \right] + \\ + (uK_d)^2 \frac{2+N}{144} [5 \ln t - 3 \ln^2 t], \end{aligned} \quad (\text{D.3})$$

$$z_4 = 1 + (u K_d) \frac{2+N}{12} \left[ \ln t - \frac{\varepsilon}{4} \ln^2 t \right] + \\ + (u K_d)^2 \left[ -\frac{2+N}{12} \ln t + \frac{(2+N)(5+N)}{144} \ln^2 t \right], \quad (\text{D.4})$$

$$z_5 = 1 + (u K_d) \frac{1}{6} \left[ \ln t - \frac{\varepsilon}{4} \ln^2 t \right] + \\ + (u K_d) \frac{1}{36} \left[ -(N+6) \ln t + \frac{N+10}{4} \ln^2 t \right], \quad (\text{D.5})$$

$$z_6 = 1 + (u K_d) \frac{2+N}{6} \left[ \ln t - \frac{\varepsilon}{4} \ln^2 t \right] + \\ + (u K_d)^2 \frac{2+N}{6} \left[ -\frac{5}{12} \ln t + \frac{4+N}{8} \ln^2 t \right]. \quad (\text{D.6})$$

Fentiekben

$$t = \frac{\tilde{A}^2}{A^2}.$$

## IRODALOM

1. L. Onsager, Phys. Rev. 65, 117, 1944.
2. L. D. Landau i E. M. Lifsic, Sztatizsziyicseszka fizika, Nauka, Moszkva, 1964.
3. H. E. Stanley, Phase Transitions and Critical Phenomena, Clarendon Press, Oxford, 1971.
4. L. P. Kadanoff et al., Rev. Mod. Phys. 39, 395, 1967.
5. G. S. Rushbrooke, J. Chem. Phys. 39, 842, 1963.
6. M. J. Coopersmith, Phys. Rev. 167, 478, 1968.
7. R. B. Griffiths, Phys. Rev. Lett. 14, 623, 1965.
- 7'. R. J. Baxter, Phys. Rev. Lett. 26, 832, 1971.
- Ann. Phys. 70, 193, 1972.
- K. Jüngling and G. Obermair, J. Phys. C 8, 579, 1975.
8. R. A. Ferrel, N. Menyhard, H. Schmidt, F. Schwabl and P. Szépfalusy, Phys. Rev. Lett. 18, 891, 1967. Phys. Lett. 24A, 493, 1967. Ann. Phys. N. Y. 47, 567, 1968.
9. a. K. G. Wilson, Phys. Rev. B4, 3174, 3184, 1971.
- b. K. G. Wilson, Phys. Rev. D3, 1818, 1971.
- c. K. G. Wilson and J. Kogut, Phys. Rept. 12C, 75, 1974.
- d. K. G. Wilson, Phys. Rev. Lett. 28, 548, 1972.
10. a. N. N. Bogoljubov i D. V. Sirkov, Veyennije v tyeoriju kvantovannih polej, Goszizd, Moszkva, 1957.
- b. M. Gell—Mann and F. E. Low, Phys. Rev. 95, 1300, 1954.
11. M. Fowler and A. Zawadowski, Solid State Comm. 9, 471, 1971.
12. A. A. Abrikosov and A. A. Migdal, J. Low Temp. Phys. 3, 519, 1970.
13. Di Castro and Jona Lasinio, Phys. Lett. 29A, 322, 1969.
14. Di Castro, Lett. Nuovo Cim. 5, 69, 1972.
15. G. Forgács, Lett. Nuovo Cim. 10, 845, 1974.
16. G. Forgács, J. Sólyom and A. Zawadowski (megjelenés alatt).
17. R. Abe, Prog. Theor. Phys. 48, 1414, 1972. Prog. Theor. Phys. 49, 113, 1973.
- R. Abe and S. Hikami, Prog. Theor. Phys. 49, 442, 1973.
18. C. G. Callan Jr., Phys. Rev. D2, 1541, 1970.
- K. Symanzik, Comm. Math. Phys. 18, 227, 1970. Comm. Math. Phys. 23, 49, 1971.



19. *A. M. Poljakov*, ZSETV, 55, 1026, 1968.  
*A. A. Migdal*, ZSETV 55, 1964, 1968.
20. a. *R. Abe*, Prog. Theor. Phys. 52, 1135, 1974.  
 b. *R. Abe* and *S. Hikami*, Progr. Theor. Phys. 52, 1463, 1974.  
 c. *I. Kondor* and *P. Szépfalussy*, Phys. Lett. 47A, 39, 1974.  
 d. *E. Brezin*, *C. De Dominicis* and *J. Zinn-Justin*, Saclay Preprint Dph—T(75)17.  
 e. *C. De Dominicis*, Saclay Preprint Dph—T(74)10.  
 f. *B. I. Halperin*, *P. C. Hohenberg* and *S. Ma*, Phys. Rev. Lett. 29, 1548, 1972. Phys. Rev. B 10, 139, 1974.
21. *G. Benedittin*, *C. Di Castro*, *G. Jona-Lasinio*, *L. Peliti* and *A. L. Stella* (preprint).
22. *C. Di Castro* and *G. Jona-Lasinio*, Phys. Lett. 29A, 322, 1969.
23. *E. Brezin*, *J. C. Le Guillou* and *J. Zinn-Justin*, Phys. Rev. D8, 434, 1973.
24. *E. Brezin*, *J. C. Le Guillou* and *J. Zinn-Justin*, Phys. Rev. D8, 2418, 1973.  
*E. Brezin*, *C. De Dominicis*, *J. Zinn-Justin*, Lett. Nuovo Cim. 9, 483, 1974.
25. *C. Di Castro*, Rivista Nuovo Cim. 1, 199, 1971.
26. *J. D. Bjorken* and *S. D. Drell*, Relativistic Quantum Fields, McGraw-Hill Publ. Co., N. Y. 1965.
27. *E. K. Riedel* and *F. J. Wegner*, Z. Phys. 225, 195, 1969.
28. *E. Brezin*, *J. C. Le Guillou* and *J. Zinn-Justin*, Phys. Rev. B8, 5330, 1973.
29. *L. Sz. Pontrjagin*, Közönséges differenciálegyenletek. Akadémiai Kiadó, Budapest, 1972.
30. *K. G. Wilson*, Phys. Rev. 179, 1499, 1969.
31. *L. P. Kadanoff*, Phys. Rev. Lett. 23, 1430, 1969.
32. *E. Brezin*, *C. De Dominicis* and *J. Zinn-Justin*, Lett. Nuovo Cim. 10, 849, 1974.
33. *B. Hu*, Phys. Lett. 49B, 196, 1974.
34. *N. Menyhárd* and *J. Sólyom*, J. Low Temp. Phys. 12, 529, 1973. *J. Sólyom*, J. Low Temp. Phys. 12, 547, 1973.
35. *J. Sólyom*, J. Phys. F., 4, 2269, 1974.

Technikai szerkesztő: Turchányi György  
A kiadásért felelős az Akadémiai Kiadó igazgatója — Műszaki szerkesztő: Agócs András  
A kézirat beérkezett: 1976. augusztus 11. — Terjedelem: 8,4 (A/5) ív  
75-4095 — Szegedi Nyomda — F.v.: Dobó József





A MAGYAR  
TUDOMÁNYOS AKADÉMIA  
MATEMATIKAI ÉS FIZIKAI TUDOMÁNYOK  
OSZTÁLYÁNAK

# KÖZLEMÉNYEI

Matematikai, fizikai, csillagászati dolgozatokat, referátumokat, könyvismertetéseket, a Tudományos Minősítő Bizottságnak a III. Osztályra vonatkozó híreit s a III. Osztály híreit közli. Évenként egy kötet (kb. 40 ív) jelenik meg (négy szám alkot egy kötetet).

A Közlemények előfizetési ára kötetenként, azaz évenként 60 Ft. Belföldi megrendelések az Akadémiai Kiadó, 1363 Budapest V., Alkotmány u. 21. Pénzforgalmi jelzőszámunk 215-11 488, külföldi megrendelések a „Kultúra”

Könyv- és Hírlap Külkereskedelmi Vállalat,

1011 Budapest I., Fő utca 32.

Pénzforgalmi jelzőszám: 218-10 990 útján eszközölhetők.



Ára: 10,—Ft  
Előfizetés kötetenként: 48,— Ft

INDEX: 26491 ISSN 0025—0104
--------------------------------

## TARTALOMJEGYZÉK

<i>Bergou János:</i> Fényszórás kétatomos molekulákon .....	1
<i>Tarján Imre:</i> Nagytisztaságú alkalihalogenid egykristályok előállítása és tulajdonságai .....	41
<i>Forgács Gábor:</i> Kritikus jelenségek és a multiplikatív renormalizációs csoport .....	51

307.226

IV

# MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

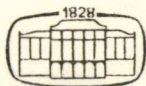
A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA  
III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

KOVÁCS ISTVÁN, NAGY ELEMÉR,  
PÁL LÉNÁRD ÉS SZALAY SÁNDOR  
KÖZREMŰKÖDÉSÉVEL

SZERKESZTI  
JÁNOSSY LAJOS

XXV. KÖTET

2. FÜZET



AKADÉMIAI KIADÓ  
MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA  
BUDAPEST 1977

2



# MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

## A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

KIADÓHIVATAL: 1363 BUDAPEST V., ALKOTMÁNY UTCA 21. SZ.

A Magyar Fizikai Folyóirat a magyar fizikus kutatók lapja. A lap célja a magyar fizikai kutatás korszerű szinten való támogatása, elsősorban összefoglaló jellegű cikkek, tanulmányok stb. közlése által. Ilyen dolgozatok megjelentetésével a lap tájékoztatást kíván nyújtani a fizika különböző kutatási területeinek jelenlegi eredményeiről, problémáiról, további célkitűzéseiről. A lap „A klasszikus irodalomból” című rovatában rendszeresen közöl egy-egy téma köré csoportosított, immár klasszikussá vált cikkeket, amelyek a témakör befejezése, átlagosan 10—10 dolgozat megjelenése után a folyóiratfüzetekről leválasztva, az alsó lapszámozás szerint összekötve, önálló köteteket képeznek. A folyóirattól évenként egy kötet jelenik meg hat füzetben, füzetenként átlag 6 ív terjedelemben.

A kéziratok a következő címre küldendőek:

Jánossy Lajos akadémikus  
1121 Budapest XII., Konkoly Thege út  
Központi Fizikai Kutató Intézet

Ugyanerre a címre küldendő minden szerkesztőségi levelezés.

A közlésre el nem fogadott kéziratokat a szerkesztőség lehetőleg visszajuttatja a szerzőkhöz, de felelősséget a beküldött, el nem fogadott kéziratok megőrzéséért vagy továbbításáért nem vállal.

A folyóirat előfizetési ára kötetenként 48 Ft. Belföldi megrendelések az Akadémiai Kiadó, 1363 Budapest V., Alkotmány utca 21. (pénzforgalmi jelzőszámunk 215-11 488), külföldi megrendelések a „Kultúra” Könyv- és Hírlap Külkereskedelmi Vállalat, 1389 Budapest I., Fő utca 32. (pénzforgalmi jelzőszám: 218-10 990) útján eszközölhetők.

A kéziratokkal kapcsolatban a szerkesztőség a következőket kéri a szerzőktől:

1. A dolgozat elé rövid tartalmú ismertetőt írnak.
2. A levezetéseknek csak a gondolatmenetét és főbb lépéseit közöljük. Ha részletezésre lesz szükség, a szerkesztőség azt külön fogja kérni.
3. A kéziratokat gépelve, egy oldalra írva, 4 cm-es margóval, kettős sorközzel készítsék el.
4. Az ábrákat ceruzával, sima fehér papírra rajzolják. A nyomda számára a rajzok elkészítését a Kiadó vállalja.
5. Az ábrák alá rövid magyarázószöveget írnak.
6. A kéziratban az érvényben levő kiadói előírások szerint adjanak szedési útmutatásokat.
7. A szövegben az irodalmi utalásokat szögletes zárójelbe tegyék. Az irodalmi adatok megadásakor a folyóiratban kialakult formát használják.

# A LAKÓSZOBÁK LEVEGŐJÉBEN VÁRHATÓ RADON-, VALAMINT TORON-KONCENTRÁCIÓ BECSLÉSE, ÉS A SZÁMÍTOTT ÉRTÉKEK KÍSÉRLETES ELLENŐRZÉSE

TÓTH ÁRPÁD

MÉV Egészségügyi Szolgálat, Pécs

Az emeleti fekvésű, téglafalazatú, betonfödémű hazai modellszobák levegőjében várható radon- és toronkoncentráció, a közleményben részletezett feltevések teljesülése esetében,  $C_{Rn} \approx 9,4 \cdot 10^{-8} \cdot C_{Ra} \cdot k^{-1}$  [pCi Rn/liter], illetve  $C_{Tn} \approx 2 \cdot 10^{-7} \cdot C_{Th}$  [pCi Tn/liter]; ahol a  $C_{Ra}$  és a  $C_{Th}$  a falazat (födémek)-beli  $^{226}\text{Ra}$ - és  $^{228}\text{Th}$ -koncentrációk, [pCi/tonna]-ban,  $k$  az effektív légcsere sebesség [óra<sup>-1</sup>]-ben. A vöröstégla-falazatra vonatkozó átlagos  $C_{Ra}$ - és  $C_{Th}$ -mal, valamint a szerző által hazai lakásokra meghatározott  $k$ -légcserevel a *Kriszjuk és mtsai* képleteivel számított szobalevegő-beli koncentrációk jól egyeznek a szerző által hazai lakószobák levegőjében mért átlagos Rn- és Tn-koncentrációkkal. Az építőanyagok emanálás szempontjából megközelítő, vonatkoztatási szintnek vehetők a vöröstégla-falazatokra kapott 1,9 pCi Ra/g és 1,4 pCi Th/g átlagos koncentrációk, ha a közlemény többi feltevése is teljesül.

## Bevezetés

Ismert, hogy a lakóépületek szerkezeti anyagai természetes sugárzókat tartalmaznak. Hazánkban a következő 15—20 év alatt 1,5—2 millió új lakás fog felépülni. Ennek következtében a fenti két évtized alatt az ország jelenlegi lakosságának kb. fele kerül új, a régitől eltérő környezetbe. Megváltozik a lakásokban ezáltal a populáció természetes sugárdózisa is. A népgazdaság ugyanakkor napjainkban egyre szélesebb körben alkalmazza a radioaktív izotópokat. A jövőendő nemzedékek egészségének megóvása érdekében ezért igen fontos az, hogy a lakosság összes, azaz (otthoni + munkahelyi)-sugárterhelése mennyivel kisebb maradjon, illetve ne legyen nagyobb, mint a jelenlegi sugárterhelés eloszlási kép szerinti.

Kiderült [1, 2], hogy az építőanyagok előzetes radiológiai minősítésével kiszűrhetők az átlagostól radioaktívabb épületszerkezeti anyagok. Így pedig, — kis munka- és költségdóbblettel — jelentősen csökkent az érintett populáció természetes sugárterhelése.

Az építőanyagok előzetes radiológiai minősítése azt jelenti, hogy meg kell mérni

- a) az építőanyagok  $^{232}\text{Th}$ -,  $^{226}\text{Ra}$ - és  $^{40}\text{K}$ -tartalmát [3],
- b) az építőanyag radioaktív gáz (Rn-, Tn-) leadására jellemző, ún. „emanációs tényező”-t, illetve az emanációs tényezőnek az építőanyagbeli rádium tartalommal való szorzatát: az effektív (emanáló) rádium tartalmat [4, 5, 22], és
- c) a Rn (és Tn)-nak az építőanyagokban való, ún. „diffúziós hossza”-t [5], mely egyébként

$$l = (D \cdot \lambda_{Em}^{-1})^{1/2}, \quad (1)$$

\* Érkezett 1976. január 27-én lektorálás után.  
Először beküldve 1975. ápr. 15-én



ahol  $D$ : az adott építőanyagra és emanációra vonatkozó diffúziós tényező ( $\text{cm}^2 \cdot \text{sec}^{-1}$ ), és

$\lambda_{\text{Em}}$ : az emanáció radioaktív bomlási konstansa, ( $\text{sec}^{-1}$ ).

A fenti, mért értékeket behelyettesítve a *Kriszjuk és mtsai* [5] közölte egyenletek alapján lentebb ismertetett lakószoba modellre [11] általunk levezetett becslési összefüggésekbe, számítható a modellszoba levegőjében várható  $^{222}\text{Rn}$  és  $^{220}\text{Rn}$  (toron)-koncentráció. A számított értékeket összehasonlítjuk a már eddig megépült lakásokban uralkodó átlagos koncentrációkkal [14, 16, 18], mint vonatkozási szinttel, mivel jelenleg még nem ismeretesek a lakások természetes radioaktivitását megszabó, nemzetközileg elfogadott szintek, legfeljebb előzetes becslések [4, 5, 6, 7, 8, 9, 10]. (Ezeket az előzetes becsléseket és jelen modellszámításaink eredményeit is, meg kell még erősíteni majd modellkísérletekkel.)

Ha a számított koncentrációk nem haladják meg szignifikánsan a jelenlegi (már megépült) lakóházakban mért átlagos koncentrációkat, akkor a szóban forgó építőanyagokat új lakások létesítésére fel lehet használni, ellenkező esetben az építőanyagokat lakásépítésre egyelőre nem célszerű alkalmazni.

### A koncentráció-becsléshez használt feltevések, kiindulási adatok, képletek

1. A modellszoba [11] elsőemeleti fekvésű, így a modellszoba levegőjébe nem juthat be a talajban keletkezett radon- és toron-gáz. A modellszoba [11] bérházban helyezkedik el, így öt oldalról szobák határolják.

2. A modellszoba hatodik oldala (az egyik főfal) szabad területre (utcára, udvarra) néz és ezen az oldalon egy  $1,54 \text{ m}^2$  felületű ablak helyezkedik el. Az ablakkal szemben fekvő (belső) válaszfalon egy  $1,9 \text{ m}^2$  felületű ajtó található.

3. A modellszoba egyes adatait az *I. táblázat*ban foglaljuk össze.

4. A modellszoba belméretei:  $5,2 \text{ m} \times 4,2 \text{ m} \times 2,65 \text{ m}$ .

5. A modellszoba térfogata:  $V = 58 \text{ m}^3$ .

6. A modellszoba belső felülete, leszámítva az ajtó és az ablak felületeit,  $S = 90 \text{ m}^2$ .

7. A modellszobára a (felület/térfogat)-arány  $= S/V = 1,55 \text{ m}^{-1}$ .

8. A modellszobának mind a hat határoló elemében azonos a ( $C_{\text{Ra}}$ ,  $C_{\text{Th}}$  és  $C_{^{40}\text{K}}$ -val jelölt)  $^{226}\text{Ra}$ -,  $^{232}\text{Th}$ -, és  $^{40}\text{K}$ -koncentráció.

9.  $d = 0,223$  méter a modellszoba (határoló épület elemek tömegével súlyozott) átlagos falvastagsága.

### I. TÁBLÁZAT

A modellszoba egyes paramétereit

Határoló épületem	Anyag	Vastagság (méter)	Sűrűség (tonna/ $\text{m}^3$ )	Súly (tonna)
Főfalak (2 db)	tégla	0,25	1,6	9,36
Válaszfalak (2 db)	tégla	0,15	1,6	5,52
Födémek (2 db)	beton	0,23	2,1	21,10

10.  $\rho = 1,893$  tonna/m<sup>3</sup> a modellszobának (a határoló épületelemek tömegével súlyozott) átlagos sűrűsége.

11. A modellszobát határoló épület-elemekre vonatkozó, a megfelelő tömegekkel súlyozott átlagos radondiffúziós hossz, *Kriszjuk és mtsai* [5] adatai alapján,  $l_{Rn} = 0,1365$  méter. Eszerint (és az előző (1) egyenlet alapján) a megfelelő átlagos radondiffúziós tényező értéke:  $D_{Rn} = 3,9 \cdot 10^{-4}$  (cm<sup>2</sup> · sec<sup>-1</sup>).

12. A (fél falvastagság/radon diffúziós hossz)-arány, radonra, a fenti súlyozott átlagokkal

$$b_{Rn} = \left( \frac{d/2}{l_{Rn}} \right) = 0,82 < 1,0. \quad (2)$$

13. Mivel az azonos közegre (pl. falazatra) vonatkozó radon- és toron-diffúziós tényezők gyakorlatilag megegyeznek [12], ezért közelítőleg igaz, hogy a diffúziós hosszak aránya:

$$\left( \frac{l_{Rn}}{l_{Tn}} \right) \approx \sqrt{\frac{\lambda_{Tn}}{\lambda_{Rn}}} = 77,86, \quad (3)$$

ahol  $\lambda_{Tn}$  és  $\lambda_{Rn}$  a toron, illetve a radon radioaktív bomlási állandói, azonos egységben (pl.: 45,8 óra<sup>-1</sup> és  $7,555 \cdot 10^{-3}$  óra<sup>-1</sup>).

Ezért a toron átlagos diffúziós hossza a modellszoba falazatában csupán:

$$l_{Tn} \approx 1,753 \cdot 10^{-3} \text{ méter.}$$

14. A (fél falvastagság/toron-diffúziós hossz)-arány, toronra, fentiek alapján

$$b_{Tn} \approx \left( \frac{d/2}{l_{Tn}} \right) \approx 63,61 \gg 1,0. \quad (4)$$

15. A lakószobát határoló épületszerkezeti elemekből, a szoba légtere irányába tartó emanáció fluxusa (vagy az exhaláció sebessége), a diffúziós egyenlet alapján, a konvektív gázáramlás elhanyagolásával, első közelítésben, [5]:

$$J_{Em} \approx J_{Em}^{\circ} \cdot \frac{th \cdot b}{b} [\text{pCi Em/m}^2/\text{óra}], \quad (5)$$

16. ahol a

$$J_{Em}^{\circ} = C_i \cdot K_{Em} \cdot \lambda_{Em} \cdot \frac{d}{2} \cdot \rho [\text{pCi Em/m}^2/\text{óra}], \quad (6)$$

a lakószobát határoló épületszerkezeti elemekből fejlődhető, *maximális* emanáció-fluxus. Ebben a képletben a

17.  $C_i$  a szobafalazat (födémek)-beli <sup>226</sup>Ra-, illetve <sup>232</sup>Th (<sup>224</sup>Ra)-koncentráció, [pCi/tonna].

18.  $K_{Em}$  az adott emanációra és falazat (födém)-ra vonatkozó emanációs tényező értéke [4, 5, 22], (puszta szám), melynek a lakásviszonyok esetében előforduló kis hőfok-, valamint kis nedvességtartalom-függése elhanyagolható [25]. Eltekintünk az emanációs tényező légnyomásfüggésétől is. *Kriszjuk és mtsai* szerint [5] radonra és a Szovjetunió-beli

vöröstégla-falazatokra:  $K_{Rn} = 0,02$ , míg radonra és nehézbeton födémekre:  $K_{Rn} = 0,05$ .



19. A modellszobánkat határoló épületszerkezeti elemek tömegeivel súlyozott, radonra vonatkozó átlagos emanációs tényező, így, feltevésünk szerint:

$$K_{Rn} \approx 0,038.$$

20. Feltesszük, hogy toronra is közelítőleg ugyanakkora az emanációs tényező értéke, azaz,

$$K_{Tn} \approx 0,038.$$

Itt említjük meg, hogy a magyarországi építőanyagok radonra vonatkozó emanációs tényezőjének, illetve effektív radium-tartalmának meghatározása már folyamatban van. Az előzetes eredményekről már beszámoltunk [4], részletes közleményt erről a közelmúltban publikáltunk [22].

21. A (6) egyenletben a  $\lambda_{Em}$  a megfelelő (Rn vagy Tn) emanáció radioaktív bomlási állandója,  $[\text{óra}^{-1}]$  egységben, a  $d$  a falazat (födém) vastagsága, [méter],  $\varrho$  a falazat (födém) sűrűsége  $[\text{tonna}/\text{m}^3]$  (vö.: (1) képlet, valamint a 9. és 10. pont). Az (5) egyenletbeli  $b$ -arány értékét a (2) és (4) egyenlettel már korábban megadtuk.

22. Egyébként, visszatérve az (5) egyenletre, *Kriszjuk és mtsai* [5] szerint, ha  $a < b$  (mint nálunk, a  $^{222}\text{Rn}$  és a modellszoba paraméterek esetében az teljesül, lásd a (2) egyenletet), akkor a

$$\frac{\text{th } b}{b} \approx 1,0 \quad (7)$$

és ekkor a  $J_{Em} \approx J_{Em}^*$ , azaz, ekkor a lehetséges legnagyobb emanáció mennyiség áramlik ki a falazatból.

Így a fenti modellszoba — falazat Rn — exhalációjának a sebessége

$$J_{Rn} \approx C_{Ra} \cdot \lambda_{Rn} \cdot K_{Rn} \cdot \frac{d}{2} \cdot \varrho \quad [\text{pCi Rn}/\text{m}^2/\text{óra}]. \quad (8)$$

Ezt a maximális értéket a falazatban a diffúzió mellett fellépő konvektív gázáramlás hatása sem tudja már tovább növelni.

(Egyébként a (8) képletet a konvektív gáz-fluxusra érvényes  $\vec{\gamma}_2 = c^* \vec{v}$  egyenlet [13] alapján is megkaphatjuk, feltételezve, hogy a konvektív gázáramlás a térnek egyetlen, kitüntetett, a szoba légtére felé tartó irányában következnek be (ahol a  $c^*$  a falazatbeli radon-gáz-koncentráció  $[\text{pCi}/\text{m}^3]$  és  $v$  a konvektív sebesség  $[\text{m}/\text{óra}]$ ), így írható, hogy a  $^{222}\text{Rn}$ -ra és a falazatra a konvektív fluxus közelítőleg

$$J_{Rn}^{\text{konv}} \approx C_{Ra} \cdot \left(1 - e^{-\lambda_{Rn} \frac{d}{2v}}\right) \cdot K_{Rn} \cdot \varrho \cdot v \quad \left[ \frac{\text{pCi Rn}}{\text{m}^2, \text{óra}} \right], \quad (9)$$

ahol a  $(C_{Ra}) = \text{pCi Ra}/\text{tonna}$ ,  $(\varrho) = \text{tonna}/\text{m}^3$  és

$(v) = \text{méter}/\text{óra}$ .

A (9) képlet a (8)-ra egyszerűsödik, ha kicsi a  $(d/2v)$ -időtartam értéke, és egyszerűsítünk, miután sorba fejtettük a zárójeles exponenciális kifejezést és elhanyagoltuk a magasabbrendű tagokat.)

23. Ha viszont az (5) egyenletben a  $b > 1$ , amely feltétel várhatóan mindig igaz a toronra és a szokásos vastagságú lakásfalazatokra, akkor [5] szerint a

$$\frac{\text{th } b}{b} \approx \frac{1}{b} \quad (10)$$

és ekkor a [4], [6] és [10] egyenletek alapján az emanáció (a toron-) exhaláció sebessége

$$J_{Tn} \cong \frac{J_{Tn}^0}{b} \cong \frac{C_{Th} \cdot \lambda_{Tn} \cdot K_{Tn} \cdot \frac{d}{2} \cdot \varrho}{63,61} \left[ \frac{\text{pCi Tn}}{\text{m}^2, \text{óra}} \right]. \quad (11)$$

A (11) egyenlet- (pontosabban: egyenlőtlenség)-be írott „ $\cong$ ”-jellel érzékeltetni azt kívánjuk, hogy a pusztán a diffúzió feltételezésével kapott, (11) egyenlettel leírt toron fluxust megnövelhetik a falazatban (szélnyomás, hőmérséklet különbség, szellőztetés miatt) jelentkező konvekciós effektusok [23].

24. Feltételezzük, hogy modellszobánkban a szellőztetés állandósult (egyensúlyi) állapotban van.

25. Feltesszük továbbá, hogy a modellszoba radontól és torontól mentes külső levegővel szellőzik,  $k$  (óra<sup>-1</sup>) természetes effektív légcseresebességgel.

26. A falazatból fejlődött Rn egyenletesen keveredik el a szoba levegőtérfogatában.

27. Az állandósult szellőztetés esetében érvényes

$$\frac{dC_{Em}}{dt} = J_{Em} \cdot S - \lambda_{Em} \cdot C_{Em} - k \cdot C_{Em} = 0$$

differentiál-egyenlet megoldásaként, a modellszoba levegőjében levő egyensúlyi radon-tartalmat így írhatjuk fel, figyelembe véve a (8) egyenletet, emellett azt, hogy lakószoba szellőzési viszonyokra a  $\lambda_{Rn} \ll k$ , valamint elhanyagolva a talajból [20] és a szellőztető levegőből a modellszobába kerülő radont:

$$C_{Rn}^e = \frac{J_{Rn} \cdot S}{(\lambda_{Rn} + k)V} \approx \frac{J_{Rn} \cdot S}{k \cdot V} \approx \frac{C_{Ra} \cdot \lambda_{Rn} \cdot K_{Rn} \cdot \frac{d}{2} \cdot \varrho \cdot S}{k \cdot V} \cdot 10^{-3} \left[ \frac{\text{pCi Rn}}{\text{liter}} \right]. \quad (12)$$

Beírva a (12) képletbe a korábban a modellszobára megadott  $K_{Rn}$ ,  $d$ ,  $\varrho$ ,  $S$  és  $V$ -értékeket, valamint a  $\lambda_{Rn} = 7,55 \cdot 10^{-3}$  [óra<sup>-1</sup>] bomlási állandót, a modellszoba-levegőben fellelő egyensúlyi radon-tartalom a falazat (födémek) [pCi Ra<sup>226</sup>/tonna]-egységben kifejezett  $C_{Ra}$  radium-tartalma és a  $k$  [óra<sup>-1</sup>] légcseresebesség esetében közelítőleg így írható

$$C_{Rn}^e \approx 9,4 \cdot 10^{-8} C_{Ra} \cdot k^{-1} \text{ [pCi Rn/liter]}. \quad (13)$$

28. Szintén stacionárius szellőztetés esetében, a modellszoba levegőjében várható egyensúlyi toron-tartalmat, a lakószoba légcserese viszonyokra érvényes  $\lambda_{Tn} \gg k$ -feltétel, valamint a (11) egyenlet figyelembevételével, így adhatjuk meg, elhanyagolva a talaj-



ből [21] a szobába jutható toron fluxust, a falazatból fejlődött Tn-nak a szobaterfogatbeli egyenletes elkeveredése esetében:

$$C_{Tn}^e = \frac{J_{Tn} \cdot S}{(\lambda_{Tn} + k) \cdot V} \approx \frac{J_{Tn} \cdot S}{\lambda_{Tn} \cdot V} \approx \frac{C_{Th} \cdot K_{Tn} \cdot \frac{d}{2} \cdot \varrho \cdot S}{63,61 \cdot V} \cdot 10^{-3} \left[ \frac{\text{pCi Tn}}{\text{liter}} \right]. \quad (14)$$

Beírva a (14)-be a modellszobára és Tn-ra korábban megadott  $K_{Tn}$ ,  $d$ ,  $\varrho$ ,  $S$  és  $V$  értékeket, a modellszoba levegőjében várható egyensúlyi toron-tartalom, a falazat (födémek) [pCi Th/tonna]-egységben vett  $C_{Th}$  ( $^{232}\text{Th}$ -, illetve  $^{224}\text{Ra}$ -) tartalma esetében:

$$C_{Th}^e \approx 1,957 \cdot 10^{-7} \cdot C_{Th} \left[ \frac{\text{pCi Tn}}{\text{liter}} \right]. \quad (15)$$

Vegyük észre a toronra vonatkozó (14) és a (15) képletekben azt, hogy azokban nem szerepel a  $k$  légcsere sebesség, hiszen — mint említettük — a lakószobák szellőzésére mindig igaz, hogy a  $k \ll \lambda_{Tn}$ . A szobalevegőbeli toron bomlástermékek (ThB és ThC) koncentrációját viszont igen erőteljesen csökkenti a  $k$  légcsere növekedése [15].

*Értékelés* (a számított és mért értékek összehasonlítása, a modell érvényességének ellenőrzése).

#### a) Radon

Zárt (8 óra hosszat mesterségesen nem szellőztetett), hazai lakószobákban bekövetkező természetes légcsere sebességre, a szerző korábban [14]  $k \approx 0,127 \text{ óra}^{-1}$  értéket vezetett le. Az ilyen kis légcsere sebesség esetében a szobalevegőbeli RaA gyakorlatilag mindig radioaktív egyensúlyban van a Rn-nal. Ezért a szerző által a 409 hazai vöröstégla-falazatú lakószobában ténylegesen mért [16] *átlagos*

$$(1,65 \pm 0,12) \text{ pCi RaA/liter}$$

RaA-koncentráció (a szórás az átlag szórása) lényegében ugyanekkora *radon*-koncentrációnak fogható fel, így a

$$\bar{C}_{Rn} \approx 1,65 \text{ pCi Rn/liter.}$$

(Az 1. ábra szerint a RaA-koncentrációk mediánja viszont csak kb. 0,8 pCi/liter. Láthatóan közelítőleg lognormális a RaA-koncentráció gyakorisági eloszlása, elég nagy egyedi szórással.)

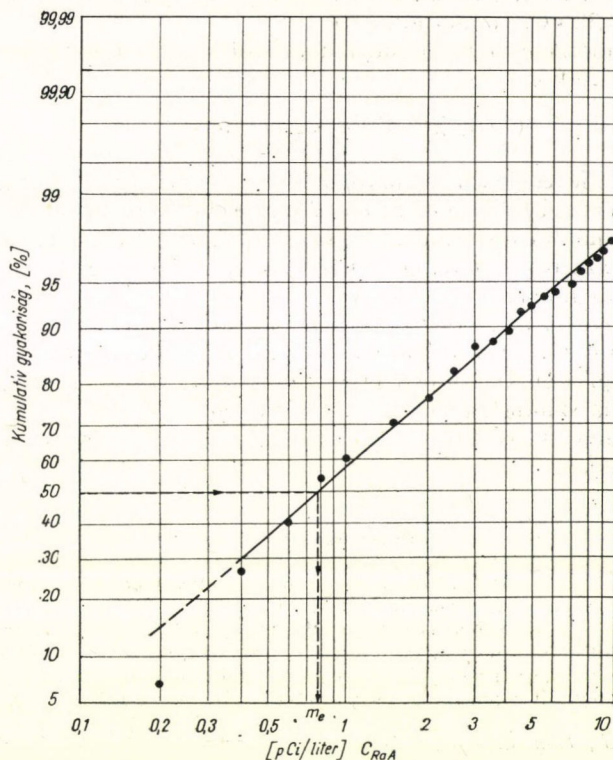
Mivel a vöröstégla-falazatok *átlagos* rádium-tartalma [3]

$$\bar{C}_{Ra} = 1,9 \cdot 10^6 \text{ pCi Ra/tonna,}$$

beírva ezt és a  $k$  fenti értékét a (13) egyenletbe, kapjuk, hogy a modellszoba levegőjében várható, *átlagos*, egyensúlyi radontartalom, közelítőleg

$$C_{Rn}^e \approx 1,41 \text{ pCi Rn/liter,}$$

amely igen jól egyezik a földszintes és emeleti fekvésű, vöröstégla-falazatú szobákban mért 1,65 pCi Rn/liter-es átlaggal, mely utóbbiban részben (a pincézetlen, földszintes lakások esetében) szerepelhet a talaj természetes radon exhalációja is [17].



1. ábra. 409, különféle lakószinteken elhelyezkedő, vöröstégla-falazatú lakószobában a levegőben, mért RaA-koncentráció kumulatív (relatív) gyakorisági eloszlása (megközelítő normalitás-vizsgálat).  $m_e$  = medián  $\approx 0,8$  pCi RaA/liter. A RaA-koncentrációk számtani átlaga = 1,65 pCi RaA/liter. (Az ábrázolás a vízszintes tengelyén logaritmikus léptékű, ún. „Gauss-hálón” történt.)

#### b) Toron

A földszinti fekvésű, különféle falazatanyagú pécsi és tatabányai lakások levegőjében a szerző mérte [18] átlagos ThB-koncentráció [14]:

megközelítőleg  $C_{ThB} \approx 0,1$  pCi ThB/liter levegő.

Feltéve, hogy ezt a ThB-koncentrációt a radonnál már említett [14]  $k=0,127$  óra<sup>-1</sup> légcseré esetében mértük, Duggan [15] alapján ilyen légcserére a

$$\left( \frac{C_{ThB}}{C_{Tn}} \right) \approx 0,3. \quad (17)$$



Így a hazai lakószobákban

$$C_{Tn} \approx 0,33 \text{ pCi Tn/liter}$$

körüli toron tartalom fordulhatott elő (ami jól egyezik a mások [19] által az emeleti lakásokra kapott 0,38 pCi Tn/liter átlaggal).

Ha a (15) egyenletbe írjuk a vöröstégla-falazatok átlagos  $1,4 \cdot 10^6$  [pCi Th/tonna] Th-koncentrációját, akkor

$$C_{Tn} \gtrsim 0,274 \text{ pCi Tn/liter}$$

lesz a modellszoba levegőjében várható, átlagos, egyensúlyi Tn-tartalom értéke, amely jól egyezik a hazai lakószobákra fent levezetett 0,33 pCi Tn/liter-rel.

Mindezek alapján jó összhang mutatkozik a modell és a tapasztalat között. Eszerint a fenti falazatbeli és levegőbeli koncentrációkat *megközelítő vonatkoztatási szinteknek* is lehet tekinteni.

Fontos megjegyezni azt, hogy — a fentebb közölt feltevések teljesülése esetén — az emanáció fejlődése szempontjából vonatkoztatási szintnek tekinthető falazatbeli 1,9 pCi Ra/gramm és 1,4 pCi Th/gramm Ra- és Th-„koncentráció-kettős”, ugyancsak referencia szintnek vehető — az egyébként nem emanáló  $^{40}\text{K}$ -ra kapott 15 pCi/gramm értékkel kiegészítve — a lakószoba falazat gammadózis-intenzitása szempontjából is [24].

#### IRODALOM

1. K. Z. Morgan, Adequacy of Present Radiation Standards, Presented at the Environmental and Ecological Forum, Silver Spring, Maryland, Jan. 20. 1971.
2. A. S. Goldin, pp. 47—56, in: Report HASL-269, Workshop on Natural Radiation Environment, (March 1972), Health and Safety Laboratory (AEC), New York, Aug. 1972, 80 p.
3. Tóth Árpád, Pauka Imre, Cementek, pécsi pernyék, valamint pernyés cementek radioaktivitásának előzetes vizsgálata, Tanulmány a Pollack Mihály Műszaki Főiskola részére, Pécs, 1974. november 15.
4. Fehér I., Gémesi J., Tóth Á., A népesség természetes radioaktív izotópoktól származó sugárterhelésének vizsgálata hazánkban, Építőanyag 27, 334—336, 1975.
5. E. M. Kriszjuk és mtsai, Report SZS-157, pp. 22—27, März, 1974, Issledoványije i normirovannyije radioaktivnosztyi sztroityelnüh materialov, in: Strahlenschutz, Umwelt und Bevölkerung, 1. Seminar, Potsdam, 16—21. Okt. (1972). Újabb változata: Proc. 3<sup>rd</sup> IRPA Congress, Washington (9. Sep. 1973), CONF-730907, pp. 870—881, Feb. 1974.
6. Tóth Árpád, Javaslat a lakóépületekben, valamint építőanyagokban maximálisan megengedhető radioaktivitási szintekre. Az ÉSZ-126 J szabványtervezet vitája, ÉVM, Budapest, 1974. március 19.
7. Tóth Árpád, Javaslatok az ÉSZ-126 J szabványtervezethez, Levélbeli közlés az Építésügyi Szabványosítási Központ, Borbély Imre tud. ig. h. részére, 1974. április 12.
8. Koblinger László, Lakóterek természetes gammasugár-terhelésének számítása Monte-Carlo módszerrel, Építőanyag 27, 332—333, 1975.
9. V. F. Kozlov, Ju. Sz. Troskin, Szpravocsnyik po radiacionnoj bezopasznosztyi, Atomizdat, Moszkva, p. 63. 1967.
10. M. C. O'Riordan és mtsai, Report NRPB-R7, National Radiological Protection Board, Harwell 24 p. (Dec. 1972.)
11. Várnagy Péter, É. M. Pécsi Tervező Vállalat, személyes közlés, 1974. március.
12. A. B. Tanner, Radon Migration in the Ground, A review, pp. 161—190, in: „The Natural Radiation Environment”, (Eds.: J. A. S. Adams, and W. M. Lowder), Rice University, 1964.
13. Ju. P. Bulasevics, R. K. Hairidinov, Izv. Akad. Nauk, SzSzsR, Szer. Geofizicseskaja, No. 12. pp. 1787—1792. 1959.
14. Tóth Árpád, Megvédett kandidátusi értekezés. 1971, pp. 20., 21., 24., 149., 163.<sup>o</sup> oldal.

15. *M. J. Duggan*, Health Physics 24, pp. 301, Fig 1. (March, 1973).
16. *Tóth Árpád*, Health Physics 23, pp. 281—289, 1972.
17. *A. Sz. Szerdjukova, Ju. T. Kapitanov*, Izotopi Radona i korotkozivuscie produkti jih raszpada, Atomizdat, Moszkva, p. 159. 1969.
18. *Tóth Árpád*, Tanulmány az „Építőanyagként felhasznált salak utólagos radiológiai vizsgálata” című SZIKKTI 1-32/71. sz. kutatási témához, Pécs, 1971. december, p. 31.
19. *F. Steinhäusler*, pp. 73—74, 142—159, Dissertation, Innsbruck, Feb. 1972.
20. *G. L. Schroeder és mtsai*, Journ. Geophys. Res. 70, 471—474, 1965.
21. *W. D. Crozier*, Journ. Geophys. Res. 74, 4202, 1969.
22. *Tóth Árpád, Fehér István*, Effective  $^{226}\text{Ra}$ -content of some Hungarian building materials, KFKI — 76—8 Report, 7 p., January 1976
23. *N. P. Kartasov, G. F. Sumkov*, Atomnaja Energija 35, 155—158, 1973.
24. *Tóth Árpád*, Lakószobákban várható gammadózis-intenzitás becslése, és a számított adatok kísérletes ellenőrzése. 1977, Magyar Fizikai Folyóirat. 2. szám, 105—111 old.
25. Radon in Uranium Mining, Proceedings of a Panel on Radon in Uranium Mining, IAEA, Vienna, pp. 129—166, 1975.





# LAKÓSZOBÁKBAN VÁRHATÓ GAMMADÓZIS-INTENZITÁS BECSLÉSE ÉS A SZÁMÍTOTT ADATOK KÍSÉRLETES ELLENŐRZÉSE\*

TÓTH ÁRPÁD

MÉV Egészségügyi Szolgálat, Pécs

Közöljük a gömb alakúnak feltételezett lakószoba szerkezeti anyagaiban levő  $^{232}\text{Th}$ -+ bomlás-termékei,  $^{226}\text{Ra}$ -+ bomlástermékei, valamint  $^{40}\text{K}$  által, a lakószoba középpontjában, a levegőben előidézett  $D_e$  gammadózis-intenzitás egyszerű becslési eljárását. A közleményben részletezett feltevések teljesülése esetében a

$$D_e \approx 20 \cdot (1 - K_{\text{Rn}}) \cdot C_{\text{Ra}} + 32 \cdot (1 - K_{\text{Tn}}) \cdot C_{\text{Th}} + 2,4 \cdot C_{40\text{K}} \text{ [mrad/év]},$$

ahol a  $C_{\text{Ra}}$ ,  $C_{\text{Th}}$  és  $C_{40\text{K}}$ , a  $^{226}\text{Ra}$ -, a  $^{232}\text{Th}$ - és a  $^{40}\text{K}$ -falazatbeli koncentrációi, [pCi/g]-ban, a  $K_{\text{Rn}}$  és  $K_{\text{Tn}}$  a falazat Rn- és Tn-emanációs tényezői (puszta számok), a 20, 32 és 2,4 pedig a megfelelő, becsült dóziskonverziós tényezők. A Ra-, Th- és  $^{40}\text{K}$ -koncentrációkra (1,9; 1,4 és 15 pCi/g) átlagadatokat felvéve, a számított  $D_e$  jól egyezik a szerző által téglafalazatú lakásokban korábban mért  $D_e$  értékekkel. Eszerint az említett átlagos koncentrációkat közelítő vonatkoztatási szinteknek lehet tekinteni.

## Bevezetés

Mint ismeretes, hazánkban a következő 15—20 évben 1,5—2 millió új lakás épül. Ennek következtében hazánk lakosságának kb. fele (kb. 5 millió ember) költözik új lakásba. Az új otthoni környezetnek természetes sugárzási szempontból is megfelelőnek kell lennie [1], mivel napjainkban, a munkahelyeken a dolgozók egyre nagyobb hányada kerül mesterséges eredetű ionizáló sugárzás hatása alá. A lakás szerkezeti anyagai (falazata, földemei) okozta, várható természetes gamma sugárzási dózis-intenzitást célszerű előre (a lakás felépítés előtt) ismerni, hogy az átlagosnál nagyobb sugárzású építőanyagok beépítése megelőzhető legyen.

A lakások szerkezeti anyagaiból keletkező radioaktív gázoknak ( $^{222}\text{Rn}$ ,  $^{220}\text{Rn}$ , azaz: radonnak és toronnak) a szobalevegőben várható koncentrációi becsléséről, a belső besugárzás előidézőiről, a szerző másik [1] közleményben számolt be.

Jelen dolgozatban a szerző a lakás-falazat, valamint -födémek okozta gamma-dózis-intenzitás (azaz: a külső besugárzás) becslésének egyszerű, korábban [2, 3] kidolgozott számítási módszerét közli, melyet azóta bonyolult számítógépi eljárással [4] mások is megerősítettek.

A feladat: meghatározni az ún. „dózis-konverziós tényezők” értékeit, vagyis a koncentráció egységre eső dózisintenzitást, [mrad/év/pCi/g]-egységben, a lakás szerkezeti anyagaiban levő  $^{232}\text{Th}$ - és bomlástermékei,  $^{226}\text{Ra}$ - és bomlástermékei, illetve a  $^{40}\text{K}$ -elemre, mint gammasugárzókra (lásd a 9. pontot).

Lentebb ismertetjük az említett „dózis-konverziós tényezők” becslésének lépéseit. Végül a számított és mért értékekből levezetett dózisintenzitásokat összehasonlítjuk

\* Érkezett 1976. jan. 27-én lektorálás után:  
Először beküldve 1975 ápr. 15-én.



a lakásokban általunk korábban ténylegesen mért, normál-adatnak tekinthető dózis-intenzitásokkal.

Mivel azonban a gamma-dózisintenzitásra megvizsgált lakások szerkezeti anyagaiban levő  $^{232}\text{Th}$ -,  $^{226}\text{Ra}$ - és  $^{40}\text{K}$ -koncentrációkat pontosan nem ismertük, hanem ezeket átlagértékekkel [5] vettük egyenlőnek, ezért jelen számításaink eredményeit *modellkísérletekkel* kell még megerősíteni.

### A dóziskonverziós tényezők becsléséhez használt feltevések, kiindulási adatok, képletek

1. A lakószobát határoló épületszerkezeti elemeket

$$d = (R_k - R_{\text{ekv}}) = 0,223 \text{ méter} = 22,3 \text{ cm}$$

vastagságú gömbhéjnak [1] tételezzük fel, ahol az  $R_{\text{ekv}} = 2,7$  méter a modellszoba [1]  $S = 90 \text{ m}^2$ -es belső felületével megegyező felületű gömb sugara. Az  $R_k = 2,923$  méter pedig a gömbhéj külső részéhez tartozó sugár értéke.

2. A vöröstégla és beton-falazat (gömbhéj) átlagos sűrűsége [1]:  $\rho = 1,89 \text{ tonna/m}^3 = 1,89 \text{ g/cm}^3$ .

3. A vöröstégla-falazatbeli és beton födémekbeli többszörös gamma foton-szóródás becslése érdekében a beton-falazatra vonatkozó [8], a  $^{226}\text{Ra}$ -termékei, a  $^{232}\text{Th}$ -termékei legfontosabb  $\gamma$ -vonalaira, valamint a  $^{40}\text{K}$  gammaenergiájára vonatkozó foton-hozamokkal [9] súlyozott átlagos tömeg-energia-abszorpciós tényezőket [7] (és nem a tömeggyengülési tényezőket) használjuk, melyek értékeit I. táblázatunk tünteti fel.

4. A levegődózis-intenzitást a gömbgeometriájú [6] szoba középpontjára számítjuk.

5. Feltesszük, hogy zéró a szobalevegőbeli radontermékek, valamint torontermékek okozta gammadózis intenzitás [16, 17].

6. A lakásfalazatok (födémek) emanálnak: belőlük *eltávozik* a bennük összesen keletkezett radon, és a toron egy része, amit a  $K_{\text{Rn}}$ , illetve  $K_{\text{Tn}}$ , összefoglaló jelöléssel:  $K_{\text{Em}}$  emanációs tényezők [1, 10]-kel jellemzünk. A falazat gamma-sugárzását csak a falban *visszamaradó* emanációkból keletkező bomlástermékek hozhatják létre.

A falazatban visszamaradt, pro a falazatban összesen képződött emanáció-mennyiségek aránya  $= (1 - K_{\text{Em}})$ .

### I. TÁBLÁZAT

Súlyozott átlagos tömeg-energia-abszorpciós tényezők betonra, valamint természetes gammasugárzókra

Gamma-sugárzó (k)	Súlyozott tömeg-energia-abszorpciós tényező $\left(\frac{\mu}{\rho}\right)_{\text{tot, en}}$ , [cm <sup>2</sup> /gramm]
$^{226}\text{Ra}$ -bomlástermékei	0,0286
$^{232}\text{Th}$ -bomlástermékei	0,0273
$^{40}\text{K}$	0,0255

7. A gömbhéj (falazat)-beli gammasugárzók által a gömb alakú lakószoba középpontjában létrehozott totális (elsődleges + a falazatban többszörösen szóródott) gamma foton-fluxus közelítőleg így írható fel [6, 7], hogy:

$$\Phi \cong q \cdot \left(\frac{\mu}{\rho}\right)_{\text{tot, en}}^{-1} \cdot \left\{ \left[ 1 - \exp - \left(\frac{\mu}{\rho}\right)_{\text{tot, en}} \cdot \rho \cdot d \right] \right\} \left[ \frac{\text{foton}}{\text{s, cm}^2} \right], \quad (1)$$

ahol a  $q$  [foton/sec/gramm] a falazat fajlagos gamma-aktivitása, amely így számítható, hogy

$$q = C_i \cdot 3,7 \cdot 10^{-2} \cdot \sum n_i \text{ [foton/s/g]}, \quad (2)$$

ahol

$C_i$  = a falazatbeli radioaktív (szülő-) elem fajlagos radioaktivitása, [pCi/g],  $3,7 \cdot 10^{-2}$  = az 1 pCi-re eső, s-onkénti bomlások száma, és

$\sum n_i$  = a szülőelem egyetlen bomlására eső totális fotonhozam (értékeit lásd a II. táblázatban).

## II. TÁBLÁZAT

Természetes gammasugárzók egyes nukleáris adatai [9]

Gamma-sugárzó ( $k$ )	Totális fotonhozam, $\sum n_i$	Átlagos gammaenergia, $E_\gamma$	Totális gammaenergia, $E_\gamma \cdot \sum n_i$
	$\left[ \frac{\text{foton}}{\text{szülőelem-bomlás}} \right]$	$\frac{\text{MeV}}{\text{foton}}$	$\left[ \frac{\text{MeV}}{\text{szülőelem-bomlás}} \right]$
$^{226}\text{Ra}$ + bomlástermékei	1,721	0,816	1,40
$^{232}\text{Th}$ + bomlástermékei	2,566	0,856	2,20
$^{40}\text{K}$	0,110	1,460	0,16

8. Ismert [11], hogy a besugárzási gamma-dózis teljesítmény közelítőleg így számítható ki a  $\Phi$  [foton/sec/cm<sup>2</sup>]-fotonfluxus, valamint az  $E_\gamma$  [MeV] gammaenergia (ahol  $0,07 < E_\gamma < 3$  MeV) ismeretében, hogy

$$D_i = 1,86 \cdot \Phi \cdot E_\gamma \text{ [}\mu\text{R/óra]} = 14,23 \cdot \Phi \cdot E_\gamma \text{ [mrad/év]}, \quad (3)$$

mivel [9] alapján  $1 \mu\text{R/óra} = 7,65 \text{ mrad/év}$ .

9. A teljes besugárzási dózisintenzitás az összegét képezi a radium-sor, a torium-sor, valamint a  $^{40}\text{K}$  létrehozta dózisintenzitásoknak és így írható fel, hogy

$$D = D_{\text{Ra}} + D_{\text{Th}} + D_{^{40}\text{K}} \text{ [mrad/év]},$$

ahol pl. a radium-sorra vonatkozó, [mrad/év]-ben vett dózisintenzitást az (1), (2) és a (3) képletek alapján a következő alakban lehet megadni:

$$D_{\text{Ra}} = 14,23 \cdot k_s \cdot C_{\text{Ra}} \cdot (1 - K_{\text{Rn}}) \cdot 3,7 \cdot 10^{-2} \cdot \bar{E}_\gamma \cdot \sum n_i \cdot \frac{\left( 1 - \exp - \left(\frac{\mu}{\rho}\right)_{\text{tot, en}}^{\text{Ra}} \cdot \rho \cdot d \right)}{\left(\frac{\mu}{\rho}\right)_{\text{tot, en}}^{\text{Ra}}}.$$

A megfelelő dóziskonverziós tényező a  $D_{\text{Ra}}/C_{\text{Ra}}$  hányados.



A toriumra és a  $^{40}\text{K}$ -ra vonatkozó dózisintenzitást a fentihez hasonlóan, értelem-szerűen lehet felírni. Tehát a (3) képletbe behelyettesítve az (1) és a (2) egyenletet, valamint az *I. táblázat* és a *II. táblázat* megfelelő adatait, a (3) képletbeli  $E_\gamma$  helyébe — a bomlási sorok, mint a  $^{226}\text{Ra}$  és termékei, valamint a  $^{232}\text{Th}$  és termékei, esetében — a megfelelő, a *II. táblázat*ban közölt átlagos, illetve totális gammaenergiákat beírva, figyelembe véve a modell-falazat átlagos  $\rho=(1,893 \text{ tonna/m}^3)$  sűrűségét, átlagos  $d=0,223$  méter vastagságát, a falazatban maradt  $(1-K_{\text{Em}})$  emanáció-(bomlástermék)-hányadot (vö. 6. pont), valamint mindhárom gammasugárzó (csoport)-ra ugyanazon  $k_s=1,10$ -szeres szorzófaktorral [13] szerepeltetve a modellszobát övező lakrészekből eredő szórt foton többletet, elhanyagolva első közelítésben a  $k_s$  energiafüggését, a modell (gömbhéj)-szoba középpontjára, levegőben, az elsődleges, valamint a szórt fotonokra együttesen vonatkozó, megközelítő dóziskonverziós tényezők a következők lesznek: a bomlástermékeivel radioaktív egyensúlyban levő  $^{226}\text{Ra}$ -ra:

$$\frac{D_{\text{Ra}}}{C_{\text{Ra}}} \simeq 20 \cdot (1 - K_{\text{Rn}}) \left[ \frac{\text{mrad/év}}{\text{pCi Ra/g falazat}} \right] \quad (4)$$

(Schiager [12] erre: 19,2 mrad/év/pCi Ra/g-t kapott); a bomlástermékeivel radioaktív egyensúlyban levő  $^{232}\text{Th}$ -re:

$$\frac{D_{\text{Th}}}{C_{\text{Th}}} \simeq 32 \cdot (1 - K_{\text{Tn}}) \left[ \frac{\text{mrad/év}}{\text{pCi Th/g falazat}} \right], \quad (5)$$

végül a  $^{40}\text{K}$ -ra:

$$\frac{D_{\text{K}}}{C_{\text{K}}} \simeq 2,4 \left[ \frac{\text{mrad/év}}{\text{pCi } ^{40}\text{K/g falazat}} \right]. \quad (6)$$

10. Ha a számítógépes módszer [4] körülményeire ( $d=38 \text{ cm}$ ,  $\rho=1,7 \text{ g/cm}^3$ , vöröstégfalazat,  $K_{\text{Rn}}=0$  és  $K_{\text{Tn}}=0$ ) a fenti, közelítő eljárással határozzuk meg a dóziskonverziós tényezőket, figyelembe véve, hogy [4] „röntgen”- és nem „rad”-egységeket használt, 100 %-nak véve [4] eredményeit, az eltérések  $-16\%$ ,  $+2,5\%$  és  $+20\%$ , azaz  $\pm 20\%$ -on belüliek csupán, tehát sugárvédelmi számítások céljára megfelelő pontosságúak. A [4] által alapul vett, esetlegesen a mienktől eltérő nukleáris adatokkal, valamint geometriával is magyarázható a  $\pm 20\%$ -os különbségek egy része.

11. Visszatérve saját modellszobánkra, feltételezve, hogy a  $K_{\text{Rn}}=K_{\text{Tn}}=0,038$  [1] az emanációs tényezők értéke, a modellszoba-falazatbeli  $C_{\text{Ra}}$ ,  $C_{\text{Th}}$  és  $C_{\text{K}}$  pCi/g radium-, torium- és kálium-koncentrációk okozta levegődózis-intenzitást így írhatjuk fel, hogy:

$$D_e \simeq 19 \cdot C_{\text{Ra}} + 31 \cdot C_{\text{Th}} + 2,4 \cdot C_{\text{K}} \text{ [mrad/év]}. \quad (7)$$

12. A lakószobában mérhető totális levegődózis-intenzitás egyébként [14]:

$$D_b = \{D_c + (s_f \cdot D_f) + (s_t \cdot D_t) + D_e + D_{\text{Rn}} + D_{\text{Tn}}\} \left[ \frac{\text{mrad}}{\text{év}} \right] \quad (8)$$

(a jelölések magyarázatát lásd a következő pontban).

13. A lakáson kívül, a szabadban a totális külső levegődózis-intenzitás [14] viszont:

$$D_k = (D_c + D_f + D_t + d_{\text{Rn}} + d_{\text{Tn}}) \text{ [mrad/év]}, \quad (9)$$

ahol  $D_c \approx 28$  mrad/év a kozmikus sugárzás ionizáló komponensének dózisteljesítménye [25],

$D_f \approx 4$  mrad/év [20] a fallout, (1966-ban),

$D_t$  a terresztrikus eredetű gamma-sugárzás,

$D_e$  a lakásfalazatok gamma-sugárzása (ezt keressük),

$D_{Rn}$  és  $D_{Tn}$  a szobalevegőbeli radon- és torontermékek, a

$d_{Rn}$  és  $d_{Tn}$  a külső levegőbeli radon- és torontermékek

gamma-dózisintenzitásai, míg a lakásfalazatok közelítő transzmissziós tényezői fallout gamma-sugárzásra [15]:  $s_f \approx 0,15$  és a terresztrikus gamma-sugárzásra [14]:  $s_t \approx 0,30$ .

14. A lakószobákban előforduló radon- és torontermék-koncentrációk, valamint a szokásos lakószobák geometriai méretei esetében, [16] alapján elhanyagolhatók a  $D_{Rn}$  és  $D_{Tn}$  értékek.

15. Hasonlóképpen, első közelítésben elhanyagoltuk a külső levegőbeli kis radon- és torontermék-koncentrációk okozta  $d_{Rn}$  és  $d_{Tn}$  gammadózis-intenzitásokat is [17].

**Értékelés** (a számított és a mért gamma-dózis-intenzitások összehasonlítása, a modell érvényességének ellenőrzése).

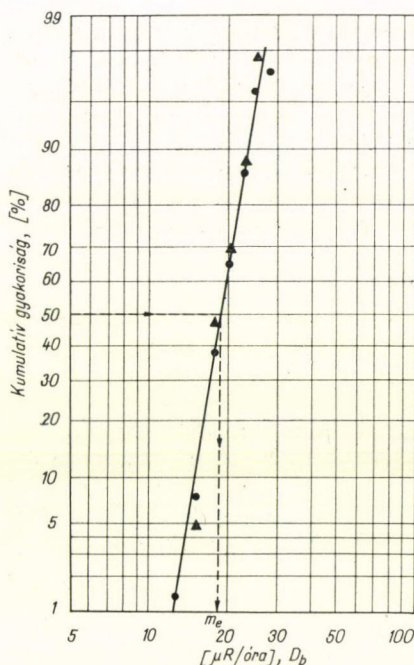
Ha beírjuk a vöröstégla-falazatokban mért [5] átlagos 1,9 pCi Ra/g-, 1,4 pCi Th/g- és 15 pCi  $^{40}\text{K}$ /g-koncentrációkat a modellszobákra vonatkozó (7) egyenletbe, azt kapjuk, hogy a modellszoba-falazat okozta, *számított* dózisintenzitás (a szoba középpontban, a levegőben)

$$D_e \approx 115 \text{ [mrad/év] lesz.}$$

Ezt a számított értéket összehasonlítjuk most az általunk korábban [18] szolnoki téglafalazatú házakban *mért* intenzitással.

Mivel a lakásokban csak a  $D_b$  totális intenzitásokat (lásd a (8) egyenletet) tudjuk mérni, ezért a  $D_e$  meghatározása érdekében szükséges volt a  $D_k$  lakáson kívüli gamma-dózisintenzitás megmérése is.

A gamma(dózis)-intenzitásokat SzRP 1a-típusú, Harshaw gyártmányú,  $25,4 \text{ Ø m} \times 34 \text{ mm}$ -es méretű NaJ/Tl/-gyel ellátott, hordozható, ratemeteres műszerrel mértük, ólom szűrő nélkül [22], mivel [22] szerint ólom szűrőre nincs szükség a természetes gamma-háttér-intenzitás mérésekor. A műszer elsődleges hitelesítését termékeivel radioaktív egyensúlyi  $^{226}\text{Ra}$ -etalonnal úgy végeztük, hogy az etalon és a szonda a földfelszíntől 3 cm távolságban helyezkedett el. Ezáltal kísé-



1. ábra. 42 vöröstégla-falazatú (▲), illetve 72 (●) különféle falazatú lakószobában mért totális levegődózisintenzitás kumulatív (relatív) gyakorisági eloszlása (megközelítő normalitásvizsgálat; az ábrázolás a vízszintes tengelyén logaritmikus léptékű, ún. „Gauss-hálón” történt).  $m_e$  = medián  $\approx 18,5 \text{ } \mu\text{R}/\text{óra} \approx 141,5 \text{ mrad}/\text{év}$ . A számtani átlag:  $D_b = 145 \text{ mrad}/\text{év}$ .



reltük meg hitelesítéskor a lakásokban előforduló szórt sugárzás „utánzását” [18, 19]. Ezáltal a mért adatokat „Ra  $\gamma$ -ekvivalens”-ben kaptuk. A másodlagos hitelesítést minden lakás-mérés előtt  $^{137}\text{Cs}$ -sugárforrással végeztük.

1966-ban, Szolnokon, a lakott területektől távol, a talajtól 2 méter magasságban szerző [18]

$$D_k \approx D_c + D_f + D_t \approx 84 \text{ [mrad/év Ra } \gamma\text{-ekvivalens]} \quad (9a)$$

totális levegődózisintenzitást mért. Ebből a  $D_t$  teresztrikus gammadózis-intenzitás, az előzőket (lásd a 13. pontot) figyelembe véve

$$D_t \approx D_k - D_c - D_f = 52 \text{ [mrad/év Ra } \gamma\text{-ekvivalens]}. \quad (9b)$$

Szintén 1966-ban, 42 szolnoki vöröstégla-falazatú lakószobában, a padlótól 1 méter magasságban elhelyezett detektorral, szerző [18] *számítani átlagként* (lásd az 1. ábrát, mely szerint lognormális az eloszlás jellege, a szórás kicsi, a medián  $\approx 141,5$  mrad/év =  $= 18,5 \mu\text{R}/\text{óra}$ ):

$$D_b \approx (D_c + s_f D_f + s_t D_t + D_e) \approx (145 \pm 4) \text{ [mrad/év, Ra } \gamma\text{-ekv]} \quad (8a)$$

totális levegődózisintenzitást mért (a  $\pm 4$  mrad/év értékű szórás a számítási átlagérték standard deviációját jelenti).

Összehasonlításként megemlíthetjük, hogy norvégiai és svédországi vöröstégla-falazatú lakóházakban a  $D_b$ -re 129 [mrad/év] [21], illetve 118 [mrad/év] [17] átlagértékeket észleltek).

A (8a) és (9b) egyenletek, valamint a 13. pontbeli számértékek figyelembevételével, a szolnoki vöröstégla-épületek falazata okozta levegődózis-intenzitás leszámaztatott, *mértnek* vehető értéke

$$D_e \approx 100 \text{ [mrad/év Ra } \gamma\text{-ekvivalens]},$$

mely a sugárvédelmi számítások esetében elfogadható hibával egyezik az „Értékelés” elején említett, számított 115 mrad/év, (nem Ra  $\gamma$ -ekvivalens) értékkel.

Ez igazolja a közelítő modellszámítások és a lakásokban mért gammadózis-intenzitások összhangját.

Fentiek szerint *megközelítő vonatkoztatási szintnek* lehet tekinteni mind a falazat gammasugárzása, mind a szobalevegő emanáció koncentrációja tekintetében [1] egyaránt (mivel az „Értékelés” fejezet elején említett „koncentráció-hármas” alapulvételével összhang mutatkozik a lakásfalazat gammasugárzását, valamint a falazat emanáció leadását [1] leíró, két közelítő modell szolgáltatja számított és a megfelelő mért, átlagosnak, normál-értéknek tekinthető eredmények között) a

$$C_{\text{Ra}} = 1,9 \text{ pCi Ra/g},$$

$$C_{\text{Th}} = 1,4 \text{ pCi Th/g}, \text{ és}$$

$$C_K = 15 \text{ pCi } ^{40}\text{K/g}-$$

„koncentráció-hármas”.

## IRODALOM

1. *Tóth Árpád*, Lakószobákban várható radon-, valamint toron-koncentráció becslése, és a számított értékek kísérletes ellenőrzése. Magyar Fizikai Folyóirat, 1977. 2. szám, 95—103 oldal.
2. *Tóth Árpád*, Javaslat a lakóépületekben, építőanyagokban maximálisan megengedhető radioaktivitási szintekre; az ÉSZ-126 J szabványtervezet vitája, ÉVM, Budapest, 1974. március 19.
3. *Tóth Árpád*, Javaslatok az ÉSZ 126 J szabványtervezethez. Levélbeli közlés az Építésügyi Szabványosítási Központ, Borbély Imre tud. ig. h. részére, 1974. április 12.
4. *Koblinger László*, Lakóterek természetes gamma-sugárterhelésének számítása Monte-Carlo módszerrel, Építőanyag 27., 9. szám, 332—333, 1975.
5. *Tóth Árpád, Pauka Imre*, Cementek, pécsi pernyék, valamint pernyés cementek radioaktivitásának előzetes vizsgálata, Tanulmány a Pollack Mihály Műszaki Főiskola részére, Pécs, 1974. november 15.
6. *R. C. McCall*, Health Physics 2, 304—309, 1960.
7. *V. I. Ivanov, V. P. Maskovics*, Szbornyik zadacs po dozimetrii i zascsite ot ionizirujuscsh izlucsenyij, Atomizdat, pp. 82, 91, 260, Moszkva 1973.
8. *E. Storm, H. Israel*, Photon Cross Sections from 0,001 to 100 MeV for Elements 1 through 100, Los Alamos Sci. Lab., New Mexico (June, 1967), orosz kiadás: Atomizdat, Moszkva, 25—28, 1973.
9. *H. L. Beck és mtsai*, Report HASL-258, Health and Safety Laboratory (AEC), New York, pp. 46, 50, 65 (Sept. 1972).
10. *E. M. Kriszjuk és mtsai*, Report SZS-157, pp. 22—27. (März, 1974) in: Strahlenschutz, Umwelt und Bevölkerung, 1. Seminar, Potsdam, 16—21. Okt. 1972.
11. *Bozóky László*, Védekezés atommagsugárzás ellen, Műszaki Könyvkiadó, Budapest, p. 156. 1960.
12. *K. J. Schiager*, Health Physics 27, 433—445, 1974.
13. *M. C. O'Riordan és mtsai*, Report NRPB-R7, National Radiological Protection Board, Harwell, 24 p. (Dec. 1972), (p. 13, 45. pont).
14. *W. M. Lowder, W. J. Condon*, Nature 206, 658—662, 1965.
15. *A. Rudloff*, Atompraxis, 7, 11—15, 1961.
16. *V. V. Alekszejev (szerk.)*, Radiometricszeszkie metodi poiszkov i razvedki uranovih rud, Goszgeoltehzdat, pp. 99—100 és 369—370, Moszkva, 1957.
17. *B. Hultqvist*, Kungl. Svenska Vetenskapsakademiens Handlingar, Fjärde Serien, 6, 22, 1956.
18. *Tóth Árpád*, Írásbeli válasz Bujdosó Ernőnek a Tóth Árpád kandidátusi disszertációjára adott opponensi véleményére, pp. 7—12, 1972. május 15.
19. *Tóth Árpád*, KSZMB Környezetvédelmi Ankétja, „D” szekció, pp. 285—288 (1973. május 22—24.), Balatonfüred.
20. Report of the Unsear, Suppl. No. 14 (A/6314), United Nations, New York, p. 5. 1966.
21. *A. Storruste és mtsai*, Health Phys. 11, 261—269, 1965.
22. *F. C. Miller*, Report UCRL-10986, University of California, Lawrence Radiation Laboratory, Aug. 22., 1963.





# FELÜLETENCENTRÁLT KÖBÖS FÉMEK ALAKÍTÁSI KEMÉNYEDÉSE\*

KOVÁCS ISTVÁN

ELTE, Általános Fizika Tanszék, Budapest

## TARTALOM

### *I. Irodalmi áttekintés*

1. Bevezetés .....	114
2. A képlékeny alakváltozás makroszkopikus leírása .....	115
2.1. Bevezetés .....	115
2.2. A képlékenységi matematikai elmélete .....	116
2.2.1. A képlékeny folyás feltétele .....	117
2.2.2. A folyási felület meghatározása .....	118
2.3. Mechanikai állapotegyenletek konstrukciója .....	120
3. Rugalmas-képlékeny anyagok termodinamikai tárgyalása .....	122
3.1. Makroszkopikus deformáció és mikrofolymatok közötti kapcsolat .....	125
3.1.1. Konjugált erők és krisztallográfiai csúszások .....	126
4. Egykristályok képlékeny alakváltozása .....	128
4.1. A képlékeny alakváltozás geometriája .....	128
4.2. Fcc kristályok csúszási rendszerei .....	130
4.3. Alakítási keményedés .....	132
4.3.1. A hőmérséklet hatása a feszültségdeformáció görbére .....	134
4.3.2. Az alakítási sebesség hatása .....	135
4.4. Polikristályok képlékeny alakítása .....	136
4.5. Az alakítási keményedés elméletéről .....	137
4.5.1. Diszlokáció elrendeződés az egyes szakaszokban .....	137
4.5.2. Az alakítási keményedés modellje .....	138

### *II. Polikristályos fcc fémek alakítási keményedése nagy deformációk esetén*

1. Bevezetés .....	139
2. Polikristályok képlékeny alakváltozása .....	140
2.1. Tiszta egytengelyű nyújtás .....	141
2.2. Tiszta csavarás .....	141
2.3. Egyidejű csavarás és nyújtás .....	142
3. A kísérleti berendezés és elvi működése .....	144
3.1. A berendezés leírása .....	144
3.2. Folyási feszültség-deformáció összefüggés meghatározása csavarási deformáció esetén .....	145
4. Kísérleti eredmények .....	147
4.1. Elektromos ellenállás .....	147
4.2. Feszültség-deformáció összefüggés .....	152
5. Az alakítási keményedésre levonható következtetések a csavarási feszültség-deformáció görbék alapján .....	156
5.1. Az alakítási keményedés II. szakasza .....	157
5.2. Az alakítási keményedés III. szakasza .....	159
5.3. Összefüggés az alakítási keményedés II. és III. szakasza között .....	163
5.4. A III. szakasz paramétereinek hőmérsékletfüggése .....	163

\* Érkezett 1976. július 13.



5.5. Az alakítási keményedés IV. szakasza .....	165
5.6. Összefüggés a III. és IV. szakasz paraméterei között .....	166
5.7. Elektromos ellenállás változás az alakítási keményedés III. szakaszában .....	167
6. Diszkusszió .....	168
6.1. A III. szakasz dinamikus megújulási jellege .....	169
6.2. A IV. szakasz makroszkopikus leírása .....	171
Irodalom .....	172

## I. IRODALMI ÁTTEKINTÉS

### 1. BEVEZETÉS

A fémek képlékeny alakítását az emberiség ösidők óta felhasználja az életét megkönnyítő számtalan eszköz készítésére. Mégis az alakításkor lejátszódó folyamatok természetének megértése felé vezető első lépés csak 1934-re vezethető vissza. Ekkor vetette fel először *Orowan* azt a gondolatot [1], hogy a kristályos szilárd anyagok nem lineáris ellenállása a növekvő alakváltozással szemben az atominál lényegesen nagyobb méretű egységek tulajdonságaiból származtatható le. Ezeket az egységeket ma diszlokációknak nevezzük, amelyeknek — mint kristályhibáknak — a létezését *Orowannal* szinte egyidőben *Polányi* és *Taylor* is felismerte [2, 3].

Csaknem húsz évnek kellett eltelnie, amíg a diszlokációk teljes polgárjogot nyertek a szilárdtestfizikában, s ennek elérése elsősorban az elektronmikroszkópos technika kifejlődésével lehetővé vált közvetlen megfigyelési módszernek tulajdonítható. 1953-ban *Cottrell* [4], 1954-ben *Seeger* [5], majd 1956-ban *Friedel* [6] munkája adott új lendületet a problémakör vizsgálatának, s ez idő óta az idevonatkozó irodalom óriási méretűvé vált mind a kísérleti mind az elméleti tevékenységet illetően. Kezdetben úgy tűnt, hogy gyorsan haladunk az alakítással kapcsolatos jelenségek mikroszerkezeti megértése felé, azonban az egyre növekvő információ-áradat újabb és újabb ellentmondásokat tárt fel. Az 1960-as évek végére már világossá vált és jelenleg is ez a helyzet, hogy az alakítás során a mikroszerkezet változását, és különösképpen ennek megfigyelését, olyan sok nem kontrollált paraméter befolyásolja, hogy egyértelmű összefüggés megtalálása a makroszkopikusan mérhető paraméterek és a mikroszerkezet között jelenleg reménytelennek tűnik.

Világossá vált az is, hogy csak az egyedi diszlokációk mozgását akadályozó hatások számbavétele nem vezethet a makroszkopikus jelenségek teljes magyarázatára. Csak a diszlokációk együttes viselkedésének, kooperatív mozgásának statisztikus tárgyalása vezethet helyes eredményre. Számos próbálkozás történt ilyen modellek megalkotására [7—11], azonban a helyes út, a hatékony módszer megtalálása még várat magára.

A következőkben megkíséreljük röviden, a teljességre messze nem törekedve, áttekinteni azokat a legfontosabb irodalmi ismereteket, amelyek között jelen dolgozat eredményei elhelyezkednek. Konkrét kristályszerkezettel kapcsolatban tárgyalásunkban csak felületcentrált köbös fémekre szorítkozunk.

Egy fém képlékeny alakváltozásának vizsgálatát két alapvetően különböző nézőpontból lehet végezni. Az egyik esetben azt keressük, hogy pl. miért keményedik egy fém növekvő alakítással, vagy egyáltalán miért olyanok a képlékenységi tulajdonságai, amilyenek. Ezekben a vizsgálatokban döntő szerep jut a kristályszerkezet és



kristályhibák figyelembevételének. A másik nézőpont esetén éppen az utóbbiak érdekeltelenek számunkra. Ekkor azt vizsgáljuk, hogy a különböző típusú, kontinuumnak tekintett anyagok milyen viselkedést tanúsítanak deformációk hatására és keressük azokat a matematikai összefüggéseket, amelyek leírják ezt a viselkedést adott határfeltételek mellett. Nyilvánvaló, hogy a lényeges különbséget a kétféle megközelítés között a különböző célok indokolják. Világos az is, hogy a gyakorlati szempontból alapvetően fontos kontinuumok mechanikája akkor lenne optimális hatékonyságú, ha az alapösszefüggéseiben figyelembe lehetne venni a mikroszkopos tulajdonságokat is. Az utóbbi években már született néhány sikeres próbálkozás [12–14], amely a két nézőpont összeegyeztetését tűzte ki célul.

## 2. A KÉPLÉKENY ALAKVÁLTOZÁS MAKROSZKOPIKUS LEÍRÁSA

### 2.1. Bevezetés

Ha egy szilárd testet külső  $\sigma_{ij}$  feszültségek hatásának vetünk alá, akkor — általános esetben — meghatározott  $\dot{\epsilon}_{ij}$  sebességű alakváltozás jön létre. Az alakváltozás sebessége a feszültségek nagyságán kívül függ a  $T$  hőmérséklettől, a feszültségek változási sebességétől és egy sor  $S_i$  szerkezeti paramétertől. Az alakváltozást leíró deformációs „állapotegyenlet” (constitutive equation [15]) ezért általában az alábbi alakban adható meg:

$$\dot{\epsilon}_{ij} = f(\sigma_{ij}, \dot{\sigma}_{ij}, T, S_1, S_2, \dots). \quad (1)$$

Az  $S_i$  szerkezeti paraméterek az anyag állapotát határozzák meg. Két különböző próbatest azonos állapotban van, ha  $S_i$  paramétereik megegyeznek. Az  $S_i$  paraméterek általában egyrészt az anyag „mechanikai állapotát” — kristályszerkezetét, hibaszerkezetét, belső feszültségeit, előzetes alakváltozás hatását, stb. —, másrészt termodinamikai állapotát jellemzik.

Az (1) összefüggést valóságos esetre egzaktul megadni jelenlegi ismereteink alapján nem lehet. A nehézséget nemcsak az  $f$  függvénykapcsolat konkrét meghatározása jelenti, hanem az is, hogy jelenleg nem világos, milyen mérhető makroszkopikus fizikai mennyiségekkel lehet a „mechanikai állapotjelzőket” megadni.

A nehézségekre egy egyszerű példa rávilágít. Alkalmazzunk két egyenlő nagyságú, de ellenkező irányú képlékeny alakváltozást egy testen. Akkor az eredő makroszkopikus alakváltozás nulla, világos azonban, hogy az alakváltozás során végbemenő mikroszerkezeti folyamatok miatt az anyag fizikai állapotában változás következett be. Ezen túlmenően adott (nulla vagy nullától különböző) makroszkopikus alakváltozást sok különféle nagyságú és irányú deformációs lépés eredményeként állíthatunk elő. Minden ilyen folyamat végén a fizikai állapotban bekövetkező változás általában más lesz. Ez azt jelenti, hogy az alakváltozás hatása a fizikai tulajdonságokra függ attól az úttól (egy alakváltozás—feszültség diagrammon), amely mentén az alakváltozás végbemehet. Ezeket a nehézségeket tovább növeli az is, hogy ugyanazon alakváltozás mértékét különböző paraméterekkel (pl. tiszta nyújtás esetén vagy a  $\Delta l/l_0$  relatív megnyúlással, vagy az  $\ln(1 + \Delta l/l_0)$  mennyiséggel) lehet és szokták jellemezni [16].

Mindez termodinamikai szempontból úgy foglalható össze, hogy a test pillanatnyi „alakja” nem állapotjelző, ellentétben a test térfogatával. Ez utóbbi egyértelműen



meghatározható, ha egy test összes többi állapotjelzőjét ismerjük. Egy test alakja azonban nem következik összes többi állapotjelzőjének ismeretéből sem.

A képlékeny alakváltozás termodinamikai tárgyalása is alapvető nehézségeket vet fel, amelyek megoldása jelenleg nem ismeretes [17]. A vázolt problémákon túl a nehézségek abból származnak, hogy a képlékeny alakváltozás folyamata szükségképpen és elkerülhetetlenül irreverzibilis. Ez jól kitűnik, ha összehasonlítjuk egy test rugalmas és képlékeny alakváltozását. Egy test adiabatikus rugalmas összenyomásakor, illetve nyújtásakor hőmérséklete — a klasszikus termodinamika alapján számítható értékkel — megnő, illetve lecsökken [18]. Adiabatikus képlékeny alakítás esetén a test összenyomásakor és nyújtásakor a hőmérséklet egyaránt növekszik, mindkét esetben a deformáció során hő fejlődik [19].

A képlékeny alakváltozás az irreverzibilis folyamatok között is extrém esetet képez. Nem alkalmazható rá a stacionárius folyamatokra kidolgozott irreverzibilis termodinamika [20], mert nem stacionárius folyamat. Továbbá nem létezik olyan reverzibilis út, amelynek során alakított állapot létrehozható lenne. *Bridgman* mindent úgy fejezte ki, hogy az alakított állapot „egy sziget az irreverzibilitás tengerében” [21].

A vázolt nehézségek indokolják azt, hogy a képlékeny alakváltozás makroszkopikus leírásakor eltekintsünk attól az igénytől, hogy olyan állapotegyenlet alapján írjuk le egy test deformációval szembeni viselkedését, amely alapvető fizikai elvekből származtatható le. Ehelyett általában az a törekvés, hogy különböző, olyan idealizált tulajdonságú testek állapotegyenletét adják meg, amelyek felhasználása lehetővé teszi egy-egy anyag meghatározott körülmények (adott határfeltételek) melletti viselkedésének kielégítő matematikai leírását. A következőkben ebben az értelemben adjuk rövid összefoglalását a képlékeny testek elméletének.

## 2.2. A képlékenységi matematikai elmélete

Extrém alakítási sebességektől eltekintve, a fémek képlékenységi tulajdonságai az alakítás sebességétől csak kis mértékben függenek. Ezért ha nem kifejezetten sebességfüggő tulajdonságokat vagy folyamatokat (pl. kúszás) vizsgálunk, akkor a sebességfüggést elhanyagolhatjuk. A képlékenységi matematikai elméletében ezt az elhanyagolást megtehetjük és csak a folyás megindulásának és mértékének feltételeit vizsgáljuk.

A képlékenységi matematikai elméletének kialakulása több mint száz éve, *Saint Venant* vizsgálataival kezdődött el [22]. Századunk első évtizedeiben kidolgozásra kerültek a legalapvetőbb idealizált tulajdonságú testek alapegyenletei, elsősorban *Haar* és *Kármán* [23], *von Mises* [24], *Hencky* [25], *Prandtl* [26] és *Reuss* [27] munkássága nyomán. A legutóbbi két évtized pedig rendkívül intenzív elméleti és kísérleti vizsgálatokat eredményezett a képlékenységi fenomenológiai tanulmányozását illetően is. Ezt világosan mutatja az eredeti dolgozatok sokaságán túl a témakörrel kapcsolatos igen nagy számú könyv, amelyekből inkább véletlenszerűen, csak egy néhányat említünk [28—33]. A problémakör intenzív tanulmányozása jól érthető elvi és különösképpen gyakorlati fontossága miatt.



### 2.2.1. A képlékeny folyás feltétele

A gyakorlatban felmerülő képlékeny alakítási folyamatokban az alakítás általában összetett feszültségállapot következményeként megy végbe. Ezért a képlékeny folyás feltételét ilyen általános esetre kell megfogalmaznunk. A kristályos szilárd anyagot ilyenkor kontinuumnak tekintjük és nem vesszük figyelembe az alakváltozás krisztallográfiai természetét [34]. Feltesszük, hogy az anyag mechanikailag izotróp és képlékeny alakváltozása állandó térfogat mellett megy végbe, azaz

$$\varepsilon_{ii} = 0, \quad (2)$$

ahol  $\varepsilon_{ij}$  a képlékeny deformációt leíró tenzor. (A következőkben a kétszer előforduló indexek összegezését jelentenek.) A (2) egyenlet igen jó közelítéssel teljesül a valóságban, mert a képlékeny alakváltozással járó relatív térfogatváltozás általában  $10^{-4}$  nagyságrendű.

A mechanikai izotrópia feltételezése azt jelenti, hogy elhanyagoljuk a Bauschinger effektust [34], azaz a folyás feltételét függetlennek vesszük az alakváltozás irányától (pl. nyújtás, összenyomás esetén).

A  $\sigma_{ij}$  feszültségtenzor mindig szétválasztható egy tiszta hidrosztatikus

$$\sigma_{ij}^h = \sigma_h \delta_{ij}; \quad \sigma_h = \frac{1}{3} \sigma_{ii} \quad (3)$$

komponensre és egy tiszta nyírási komponenseket tartalmazó

$$' \sigma_{ij} = \sigma_{ij} - \sigma_h \delta_{ij} \quad (4)$$

deviátor feszültség komponensre. Feltesszük, hogy a hidrosztatikus feszültségnek nincs hatása a folyás kialakulására. Ez a feltételezés egyértelmű összefüggésben van a mikroszerkezeti tényekkel, mert hidrosztatikus feszültség nem eredményez diszlokáción eredő erőhatást [35]. Ezért a képlékeny folyás feltételét a deviátor feszültségek közötti összefüggéssel adhatjuk meg:

$$f(' \sigma_{ij}) = 0. \quad (5)$$

A képlékeny folyás feltétele a mechanikai izotrópia miatt nem függhet a koordinátarendszer megválasztásától, ezért a  $' \sigma_{ii} = 0$  miatt az (5) összefüggés a  $' \sigma_{ij}$  tenzor második és harmadik invariánsaira vonatkozó kapcsolatot jelent. Ennek tulajdonságait a legegyszerűbben a feszültségtenzor  $(\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3)$  főtengety rendszerében mint koordinátarendszerben vizsgálhatjuk meg. Ebben a rendszerben a (3) hidrosztatikus feszültség lehetséges értékeit a koordinátatengelyekhez szimmetrikusan fekvő, origón áthaladó egyenes tartalmazza. A feszültségdeviátor nullától különböző invariánsai pedig az

$$I_2 = \frac{1}{6} [(\sigma_1 - \sigma)^2 + (\sigma_1 - \sigma_3)^2 + (\sigma_2 - \sigma_3)^2], \quad (6)$$

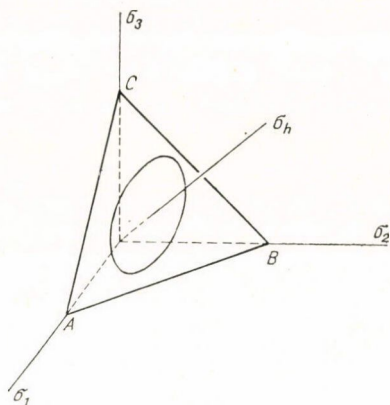
$$I_3 = (\sigma_1 - \sigma_h)(\sigma_2 - \sigma_h)(\sigma_3 - \sigma_h) \quad (7)$$

kifejezésekkel adhatók meg. Ezekkel az (5) kifejezés helyett a

$$\varphi(\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3) = 0 \quad (8)$$



egyenletet írhatjuk fel a folyás feltételeként, ami egy felületet határoz meg a  $(\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3)$  koordinátarendszerben. Ez a felület nem metszheti a (3) egyenletet reprezentáló hidrosztatikai egyenest (a folyás nem következhet be nulla deviátor feszültségek esetén), továbbá bármely pontjára a felület tükrözés szimmetrikus kell legyen a



1. ábra. A folyási felület kontúrja fő-tengely-rendszerben a hidrosztatikai egyenesre merőleges síkban

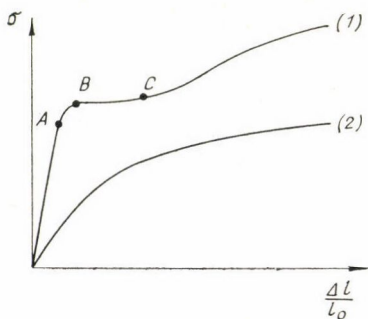
mechanikai izotrópia miatt. Ezért a (8) felület csak egy olyan hengerfelület lehet, amelynek alkotói párhuzamosak a hidrosztatikai egyenes-sel és ez utóbbi a felület szimmetria tengelye. A hengerfelület kontúrját bármely, a hidrosztatikai egyenesre merőleges (a három tengelyen azonos metszetű) síkkal való metszésvonal adja meg. Ha megköveteljük még, hogy az alakítás-hoz szükséges „plastikus munka” nem lehet negatív, akkor ebből következik, hogy ez a kontúr csak konvex görbe lehet [31] (1. ábra).

A képlékeny alakváltozás megindulásához mindig meghatározott feszültségállapot elérése szükséges. Ezért a most definiált felület fizikai jelentése az, hogy ha a test feszültségállapotát a felületen belüli, illetve kívüli pont jellemzi, akkor nincs, illetve van képlékeny alakváltozás.

Ez utóbbi bekövetkezésének a feltétele az, hogy a deviátor feszültségek elérjék a hengerfelületet. Ezért ezt a felületet a továbbiakban folyási felületnek nevezzük.

### 2.2.2. A folyási felület meghatározása

A képlékeny alakváltozás kialakulását kísérletileg a legegyszerűbben körkereszt-metszetű próbatest egytengelyű nyújtásakor vizsgálhatjuk, amikor mondjuk  $\sigma_1 = \sigma_2 = 0$  és  $\sigma_3 = \sigma$ . Ha  $\sigma$  értékét nullától kezdve fokozatosan növeljük, akkor a 2. ábrán vázolt görbéket kapjuk. Az 1. típusú görbe a tércentrált fémekre jellemző, amikor az A pontig viszonylag jól definiált egyenes mentén, tiszta rugalmas alakvál-



2. ábra. Feszültség-deformáció összefüggés különböző típusú anyagokra

tozás történik. Az A pontot arányossági határnak szokták nevezni. Tovább növelve a feszültséget a B pontig, az alakváltozás már nem tisztán rugalmas, egy része maradó lesz. Ezért a B ponthoz tartozó feszültséget rugalmassági határnak vagy folyáshatárnak nevezhetjük aszerint, hogy melyik szempontból vizsgáljuk a jelenséget. Világos azonban, hogy még az 1. típusú anyagok esetén is, amikor a képlékeny alakváltozásba való átmenetet a BC plato szakasz kialakulása viszonylag élesen jelzi, a folyáshatár definíciója nem egyértelmű. A képlékeny alakváltozás megindulásának észleléséhez véges nagyságú alakváltozás létrehozása szükséges, amelynek megválasztása megállapodás kérdése.

Ez utóbbi megállapítás méginkább érvényes fe-



lületencentrált köbös (fck) fémekre, amelyeknél a feszültség-deformáció összefüggést a 2. típusú görbe jellemzi (2. ábra). Az előbb jelzett bizonytalanságok ekkor fokozottabban jelentkeznek. Alkalmas megállapodással azonban a folyáshatár értéke gyakorlati szempontból kielégítő reprodukálhatósággal lerögzíthető. Teljesen hasonló megfigyelésekre és megállapításokra juthatunk tiszta nyírás (pl. vékony falú cső csavarása) esetén is.

Jelenlegi ismereteink alapján még a vázolt egyszerű esetekben sincs azonban mód arra, hogy ismervén az anyag bizonyos makroszkopikus jellemzőit, előre megmondjuk egyszerű fizikai elvek alapján a folyáshatárát. Még kevésbé van erre mód akkor, hogy ha összetett feszültségállapot hatását vizsgáljuk. Nem ismeretes ugyanis, hogy az egyik feszültség-komponens miképpen befolyásolja a másik hatását a folyás feltételének kialakításában. Ennek megadásához a folyási felület ismeretére lenne szükség, amelynek meghatározásához nincsenek az előbbi pontban említetteken túlmenő feltételeink.

Összetett feszültségállapotok esetén ezért a folyási felületet csak önkényesen választott további feltételekkel határozhatjuk meg, amelyek helyességéről a kísérleti tapasztalattal való összevetéssel győződhetünk meg.

Az első önkényesen választott feltétel *Trescától* származik [36]. Egyszerűen belátható, hogy főteengely rendszerben az egyes koordináta síkpárok metszésvonalán áthaladó síkokra vonatkozóan a szögfelező síkban a nyíró feszültségek maximálisak (fő nyíró feszültségek) és nagyságuk rendre:

$$\frac{|\sigma_1 - \sigma_2|}{2}, \quad \frac{|\sigma_2 - \sigma_3|}{2}, \quad \frac{|\sigma_1 - \sigma_3|}{2}.$$

Legyen pl.  $\sigma_1 < \sigma_2 < \sigma_3$ . A Tresca feltétel szerint a képlékeny alakváltozás akkor indul meg, amikor a maximális fő nyíró feszültség eléri a tiszta nyírás  $\tau_f$  folyáshatárát, tehát ha

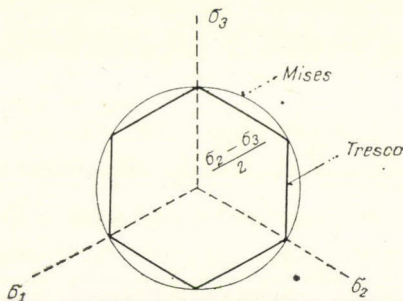
$$\frac{\sigma_3 - \sigma_1}{2} = \tau_f. \quad (9)$$

Az így definiált folyásfelület kontúrja a hidrosztatikus egyenesre merőleges síkban egy szabályos hatszög (3. ábra).

Tresca feltétele a krisztallográfiai csúszásokra vonatkozó kritikus csúsztató feszültség (I/4.1. pont) analógja izotróp kontinuum esetén. Ha  $\sigma_1 = \sigma_2 = 0$  és  $\sigma_3 = \sigma$ , akkor megkapjuk az összefüggést a Tresca feltétel alapján a tiszta nyújtás és a tiszta nyírás folyáshatára között:

$$\sigma_f = 2\tau_f. \quad (10)$$

A kísérleti tapasztalattal a Tresca feltételből kapott eredmény csak kevésbé egyezik. Lényegesen jobb egyezésre vezet és napjainkban is legjobban alkalmazható folyási feltétel, amelyet *Mises* vezetett be [34]. Eszerint a képlékeny alakváltozás akkor indul meg, ha a feszültségdeviátor (6) alatti inva-



3. ábra. A folyási felület kontúrja a Tresca és a Mises feltétel esetén



riánsa eléri a tiszta nyírás folyáshatárának négyzetét, azaz

$$\frac{1}{6} [(\sigma_1 - \sigma_2)^2 + (\sigma_1 - \sigma_3)^2 + (\sigma_2 - \sigma_3)^2] = \tau_f^2, \quad (11)$$

vagy általános koordinátarendszerben:

$$\frac{1}{6} [\sigma_{xx} - \sigma_{yy}]^2 + (\sigma_{xx} - \sigma_{zz})^2 + (\sigma_{yy} - \sigma_{zz})^2 + 6(\sigma_{xy}^2 + \sigma_{xz}^2 + \sigma_{yz}^2) = \tau_f^2. \quad (12)$$

Ez a feltétel azt foglalja magában, hogy a képlékeny alakváltozás akkor indul meg, amikor a nyírási *rugalmas* deformációkban felhalmozódó energia eléri egy, a (11), (12) összefüggéssel adott kritikus értéket. Az ekkor adódó folyási felület kontúrja egy kör (3. ábra). A tiszta nyújtás és tiszta nyírás folyáshatára közti összefüggés ekkor a következő:

$$\sigma_f = \sqrt{3} \tau_f. \quad (13)$$

Ez az összefüggés igen jól teljesül általában finomszemcsés polikristályos anyagok esetén, amikor a mechanikai izotrópia valóban jó közelítéssel fennáll [37].

A Tresca feltétel eltérése a kísérleti tapasztalattól a kritikus csúsztató feszültséggel való analógia miatt ellentmondásnak tűnhet. Valójában azonban éppen az alakváltozás krisztallográfiai természete alapján következik, hogy a Tresca feltétel nem lehet általában jó közelítés. A mechanikai izotrópia ugyanis a diszkrét csúszási rendszerek létezése miatt valójában nem folytonos izotrópiát jelent. Ezért a folyás feltételében nem tüntethetünk ki önkényes irányokat, pl. a maximális fő nyíró feszültség irányát, mert ez csak kis valószínűséggel fekszik éppen egy lehetséges csúszás irányában. Ezért az alakváltozás megindulásakor a maximális fő nyíró feszültség jelentősen nagyobb lehet a tiszta nyírás folyáshatáránál.

A Mises feltétel nem tüntet ki semmilyen önkényes irányt. Amikor a rugalmas nyírásokban felhalmozott energia eléri a kritikus értéket, akkor valamely alkalmas csúszási rendszer aktiválódik és megindul az alakváltozás. A következőkben ezért ezt a folyási feltételt fogadjuk el helyesnek.

A valódi anyagok képlékeny alakításakor a folyási felület folytonosan változik az alakítási keményedés miatt, izotrópna tekinthető anyagok esetén úgy, hogy kontúrja kitágul. A pillanatnyi folyási felület általában bonyolult módon függ az előzetes deformáció módjától és a folyamatától is.

### 2.3. Mechanikai állapotegyenletek konstrukciója

A folyási felület ismerete nem elegendő a képlékeny alakváltozás leírásához. Szükség van még olyan, mechanikai állapotegyenleteknek nevezhető összefüggésekre, amelyek a feszültségek és a kialakuló deformációk kapcsolatát adják meg. Pontosabban, mivel a pillanatnyi feszültség nemcsak az alakváltozás mértékétől, hanem attól az úttól is függ, amely mentén ezt a feszültségállapotot elértük, ezért az állapotegyenletek a deformáció növekményére vonatkozó törvényt kell megadjanak.

Az eredő  $d\epsilon_{ij}$  deformáció növekmény általában  $d\epsilon_{ij}^f$  rugalmas és  $d\epsilon_{ij}$  képlékeny részből tevődik össze, azaz

$$d\epsilon_{ij}^t = d\epsilon_{ij}^f + d\epsilon_{ij}, \quad (14)$$

ahol a képlékeny rész nem tartalmaz térfogatváltozást, azaz  $d\epsilon_{ii} = 0$ .



Legyen a vizsgált test valamilyen, a folyási felületen fekvő  $\sigma_{ij}$  feszültségállapotban és hozzunk létre  $d\sigma_{ij}$  feszültség növekményt. Tekintsük ezeket a mennyiségeket most 9 komponensű vektorokként. Ez a megfeleltetés egyértelmű, ha csak a következőkben felhasznált tenzorműveletek esetén alkalmazzuk: 1. tenzor szorzása skalárral, 2. tenzorok összeadása, 3. tenzorok skalárszorítása (pl.  $\sigma_{ij}\varepsilon_{ij}$ ). Ha  $d\sigma_{ij}$  a folyási felületen belülré mutat, akkor képlékeny alakváltozás nincs, csak a rugalmas deformációkban következik be változás. Nincs képlékeny alakváltozás azonban akkor sem, ha  $d\sigma_{ij}$  a folyási felület érintősíkjában fekszik. Ez annak a kontinuitási feltételnek a következménye [31], amely szerint feltételezzük, hogy a képlékeny alakváltozás folytonosan alakul ki. Ez a feltétel nem teljesülne, ha a kezdetben befelé mutató vektort az érintősíkbá forgatva a képlékeny alakváltozás megindulna.

Legyen adott a folyási felület a következő összefüggéssel:

$$f'(\sigma_{ij}) = \varphi(q), \quad (15)$$

ahol  $\varphi(q)$  az alakítási keményedést (a folyási felület kitágulását) jellemző skálár-függvény és  $q$  valamilyen paraméter, amely az alakítási keményedéstől függ. Előző megfontolásainkból következik, hogy a képlékeny alakváltozás növekménye csak akkor nem nulla, ha a

$$d'f = \frac{\partial f}{\partial \sigma_{ij}} d\sigma_{ij} = \frac{\partial f}{\partial' \sigma_{ij}} d' \sigma_{ij} > 0 \quad (16)$$

feltétel teljesül, ahol a második egyenlőségben kihasználtuk a (15) feltételt és  $d'f$  azt fejezi ki, hogy ez a megváltozás nem teljes differenciál. A  $\partial f / \partial \sigma_{ij}$  mennyiség a folyási felület normális irányú vektora. A képlékeny alakváltozás növekménye elsőrendben arányos  $d'f$ -fel. Ha feltesszük még, hogy a  $d\varepsilon_{ij}$  növekmény szintén a folyási felület normálisának irányába mutat (ezt egyesített folyási törvénynek nevezzük [31]), akkor a képlékeny alakváltozás növekményére a következő egyenletet írhatjuk fel:

$$d\varepsilon_{ij} = K \frac{\partial f}{\partial \sigma_{ij}} d'f, \quad \text{ha } d'f > 0, \quad (17)$$

és

$$d\varepsilon_{ij} = 0, \quad \text{ha } d'f \leq 0,$$

ahol  $K$  az alakítási keményedés hatását jellemző (ismeretlen) skálár-függvény.

Alkalmazzuk a (17) egyenletet vékony falú henger egyidejű csavarására és nyújtására a Mises folyási feltétel mellett. Ekkor a (12) összefüggés felhasználásával

$$f = \frac{1}{3} (\sigma^2 + 3\tau^2) = \tau_f^2, \quad (18)$$

ahol  $\tau_f$  most a tiszta nyírás folyáshatára,  $\sigma$  a tengelymenti ( $z$  irányú) feszültség és

$$\tau^2 = \tau_{xz}^2 + \tau_{yz}^2, \quad (19)$$

a csavarási nyíró feszültség. Legyen  $\varepsilon$  a tengelymenti nyúlási és  $\gamma$  a csavarási (nyírási) deformáció. (17) és (18)-ból:

$$d\varepsilon = \frac{2}{9} K \sigma (2\sigma d\sigma + 6\tau d\tau) \quad (20a)$$



és

$$d\gamma = \frac{2}{3} K\tau(2\sigma d\sigma + 6\tau d\tau). \quad (20b)$$

E két egyenletből kapjuk, hogy

$$\frac{d\epsilon}{d\gamma} = \frac{\sigma}{3\tau}, \quad (21)$$

függetlenül az alakítási keményedés természetétől. A nyúlási és nyírási deformáció növekmények viszonyát — a modell érvényességi határán belül —, tehát mindig a  $\sigma/3\tau$  hányados adja meg.

A fentiek alapján az egyidejű csavarás és nyújtásnak alávetett test feszültségállapotát a

$$\sigma' = (\tau, \sigma) \quad (22)$$

kétdimenziós feszültségvektorral jellemezhetjük. Ha  $\sigma'$  kielégíti a (18) feltételt, akkor a (20) deformáció növekmények jönnek létre, ezért a plasztikus munka a következő:

$$dL_p = \tau d\gamma + \sigma d\epsilon. \quad (23)$$

Transzformáljuk a (22) feszültségvektort a  $\left(\tau, \frac{\sigma}{\sqrt{3}}\right)$

koordináta rendszerbe. Ebben a rendszerben a (18) folyási felület egy kör. A folyási felület körszimmetriája azt fejezi ki, hogy a  $\tau$  és  $\sigma/\sqrt{3}$  mennyiségek

egyenértékűek abban az értelemben, hogy ha bármelyik eléri a  $\tau_f$  értékét, a képlékeny alakváltozás megindul (4. ábra).

(23) alapján a képlékeny alakváltozás növekményét leíró vektor most

$$d\epsilon^p = (d\gamma, \sqrt{3} d\epsilon). \quad (24)$$

Ez az eredmény azt fejezi ki, hogy a  $d\gamma, \sqrt{3} d\epsilon$  deformáció növekmények egyenértékűek abban az értelemben, hogy ha tiszta nyírás és tiszta nyújtás esetén a plasztikus munkák egyenlők, azaz

$$\tau_f d\gamma = \tau_f \sqrt{3} d\epsilon,$$

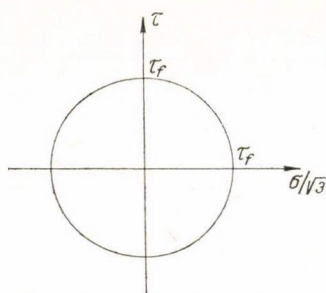
akkor

$$d\gamma = \sqrt{3} d\epsilon. \quad (25)$$

$d\epsilon$  nyúlási deformáció tehát  $\sqrt{3} d\epsilon$  tiszta nyírással egyenértékű.

### 3. RUGALMAS-KÉPLÉKENY ANYAGOK TERMODINAMIKAI TÁRGYALÁSA

Az előző fejezetben megmutattuk, hogy a képlékeny alakváltozás folyamata klasszikus termodinamikai módszerekkel nem tárgyalható. A mechanikai állapot-egyenletek konstrukciója azonban szükségképpen megköveteli termodinamikai összefüggések figyelembevételét, mert a hőmérsékleti hatások általában jelentősen



4. ábra. A folyási felület a  $(\tau, \sigma/\sqrt{3})$  koordináta rendszerben

befolyásolják a képlékeny alakváltozás folyamatát. Csak termodinamikai megfontolások alapján várható olyan általános fizikai elvek felismerése, amelyek állapotegyenletek konstrukciójához, intuitív meggondolások helyett, legalább kvalitatív fizikai alapot szolgáltatnak. Ezen fizikai elvek lehetőséget adhatnak továbbá arra, hogy kapcsolatot találjunk a makroszkopikus állapotegyenletek és a mikrofolyamatok között, illetve megmutathatják, hogy a gyakorlatban használt összefüggések a mikrofolyamatok természetével milyen mértékben egyeztethetők össze. Természetesen az elmélet jelenleg távol van attól, hogy alapvető elvekből egzakt állapotegyenleteket vezessen le. Ez azonban valószínűleg nem is kell, hogy a vizsgálatok célja legyen, mert a szigorú fizikai és matematikai meggondolásokból származó állapotegyenlet a gyakorlat számára, komplikáltsága miatt, esetleg használhatatlan lenne.

Következő meggondolásaink elsősorban *Hill* és *Rice* vizsgálatain alapszanak [12–14, 38]. Az eredmények lényege az, hogy az előzőekben említett nehézségek ellenére definiálhatók olyan termodinamikai potenciálok, amelyek lehetőséget nyújtanak mechanikai állapotegyenletek konstrukciójára.

Sebességfüggetlen esetben mechanikai állapotegyenletet a

$$\tilde{\sigma} = \tilde{\sigma}(\tilde{\epsilon}, T, X), \quad (26)$$

vagy

$$\tilde{\epsilon} = \tilde{\epsilon}(\tilde{\sigma}, T, X) \quad (27)$$

alakban adhatunk meg, ahol most  $X$ -szel jelöltük azon struktúra paraméterek összességét, amelyek a képlékeny alakváltozásból adódó állapotot jellemzik. Világos, hogy  $X$  nem egyszerű változó, hanem egy funkcionál, amely számba veszi a deformáció egész megelőző lefolyását vagy történetét.

A (26), (27) állapotegyenletek felhasználása termodinamikai meggondolásokhoz a következőn alapszik. Bármilyen deformáció történet utáni állapotban van is az anyag, bizonyos, hogy létrehozhatók olyan feszültség és hőmérséklet változások, amelyekre az anyag válasza tisztán rugalmas és ezért teljesen reverzibilis. Ilyen feszültségváltozás pl. az, amely a folyási felület belsejébe mutat (2.3. pont). A kijelentés érvényes sebességfüggő anyagok esetén is, csak akkor olyan gyors  $\tilde{\sigma}$  és  $T$  változásokat kell felvenni, amelyek során képlékeny alakváltozás még nem lép fel, mivel ez utóbbi létrejöttéhez mindig véges időre van szükség. Ezt pillanatnyi rugalmasságnak szokták nevezni.

Jelöljön tehát  $X$  egy rögzített plasztikus állapotot, amely makroszkopikus szempontból egy funkcionállal, mikroszkopikus szempontból pedig egy meghatározott mikroszerkezeti (diszlokáció, szemcsehatár, stb.) elrendezéssel jellemezhető. A rugalmas deformációval kapcsolatos állapotváltozás ilyenkor reverzibilis, ezért alkalmazhatók a termodinamikai összefüggések. Legyen az állapotváltozás során bekövetkező deformáció növekmény  $d\epsilon_{ij}$ , akkor az első főtétel szerint:

$$\sigma_{ij} d\epsilon_{ij} + T dS = dU; \quad X = \text{áll.} \quad (28)$$

ahol  $S$  és  $U$  a térfogategység entrópiáját és belső energiáját jelenti. Állandó hőmérséklet esetén:

$$\sigma_{ij} d\epsilon_{ij} = d(U - TS) = d\Phi; \quad X = \text{áll.} \quad (29)$$

vagyis a deformációs munka növekménye a  $\Phi$  szabadenergia megváltozása, tehát



teljes differenciál, azaz

$$\sigma_{ij} = \left( \frac{\partial \Phi}{\partial \varepsilon_{ij}} \right)_T, \quad X = \text{áll.} \quad (30)$$

és

$$\Phi = \Phi(\tilde{\varepsilon}, T, X). \quad (31)$$

A rögzített plasztikus állapothoz tartozó szabadenergia tehát feszültségpotenciál.

Tegyük fel, hogy a szabadenergiával együtt létezik a következő termodinamikai potenciál is:

$$\psi = \sigma_{ij} \varepsilon_{ij} - \Phi = \psi(\tilde{\sigma}, T, X). \quad (32)$$

Ez a függvény a deformációk potenciálja, mert

$$\varepsilon_{ij} = \left( \frac{\partial \psi}{\partial \sigma_{ij}} \right)_T, \quad X = \text{áll.} \quad (33)$$

$\psi$  ismeretében a plasztikus deformáció mértékét meghatározhatjuk, mert a deformáció képlekeny részének az  $\tilde{\varepsilon}$  függvény  $\tilde{\sigma}=0$  helyen felvett értékét tekinthetjük, azaz

$$\varepsilon_{ij}^p = \varepsilon_{ij}(0, T, X). \quad (34)$$

Tegyük fel most, hogy a plasztikus állapot rögzített  $\tilde{\varepsilon}$ ,  $\tilde{\sigma}$  és  $T$  mellett kis mértékben megváltozik (pl. mert a deformáció útja kis mértékben különbözik az előzőtől). Ekkor a termodinamikai potenciálok is megváltoznak, mert ezek mindig rögzített plasztikus állapotra vonatkoznak. A potenciálok ilyen megváltozásait  $d^p$  differenciál jellel jelöljük, tehát

$$d^p \Phi = \Phi(\tilde{\varepsilon}, T, X + dX) - \Phi(\tilde{\varepsilon}, T, X), \quad (35)$$

$$d^p \psi = \psi(\tilde{\sigma}, T, X + dX) - \psi(\tilde{\sigma}, T, X). \quad (36)$$

$d^p \Phi$  és  $d^p \psi$  függvénye  $\tilde{\varepsilon}$ ,  $T$  és  $X$ -en kívül minden olyan paraméter növekménynek, amely a  $dX$  állapotváltozáshoz hozzájárul. (33) és (36) felhasználásával

$$d\varepsilon_{ij} = \frac{\partial \psi(\tilde{\sigma}, T, X + dX)}{\partial \sigma_{ij}} - \frac{\partial \psi(\tilde{\sigma}, T, X)}{\partial \sigma_{ij}} = \frac{\partial d^p \psi}{\partial \sigma_{ij}}, \quad (37)$$

és hasonlóan (30) és (35)-tel

$$d^p \sigma_{ij} = \frac{\partial d^p \Phi}{\partial \varepsilon_{ij}}. \quad (38)$$

A termodinamikai potenciálok megváltozásai tehát potenciáljai a plasztikus deformáció és feszültség növekményeknek.

A teljes deformáció növekmény általában három tagból tevődik össze:

$$d\varepsilon_{ij} = M_{ijkl} d\sigma_{kl} + \alpha_{ij} dT + d^p \varepsilon_{ij}, \quad (39)$$

ahol  $M_{ijkl}$  a reciprok rugalmas állandó tenzor és

$$\alpha_{ij} = \frac{\partial \varepsilon_{ij}}{\partial T} = \frac{\partial^2 \psi}{\partial \sigma_{ij} \partial T},$$

a hőtágulási együttható.

$d\varepsilon_{ij}^p$  és  $d^p\varepsilon_{ij}$  kapcsolatának meghatározásához legyen a hőmérséklet állandó és  $M_{ijkl}$  ne függjön  $\sigma_{ij}$ -től. Ekkor az eredő deformáció a testen (az egyszerűség kedvéért elhagyva az indexeket):

$$\varepsilon = M\sigma + \varepsilon^p.$$

Ennek megváltozása:

$$d\varepsilon = Md\sigma + \sigma d^pM + d\varepsilon^p. \quad (40)$$

(39) és (40)-ből

$$d^p\varepsilon - d\varepsilon^p = \sigma d^pM. \quad (41)$$

A plasztikus deformáció kétféle növekménye tehát csak akkor pontosan egyenlő, ha a rugalmas állandók nem függenek a plasztikus állapottól. Ha ez nem áll fenn, akkor (41) azt fejezi ki, hogy ekkor a (37) deriváltja a  $d^p\psi$  potenciálnak nemcsak a (34) deformáció növekményt tartalmazza, hanem a rugalmas állandók megváltozása miatti járulékot is. Emiatt (37) jelentősen általánosabb mint a makroszkopikusan mérhető maradandó (plasztikus) alakváltozás növekménye. Bizonyos esetektől eltekintve a rugalmas állandók plasztikus deformációtól való függése elhanyagolható és ilyenkor jó közelítéssel  $d^p\varepsilon = d\varepsilon^p$ .

A fentiekben követett gondolatmenet alapját az a feltevés képezi, hogy az adott feltételek mellett a képlékeny alakváltozás során is van értelme termodinamikai potenciáloknak. A feltevés helyességét jelentősen alátámasztja az, hogy további általánosítással a fenti eredmények lehetővé teszik a makroszkopikus egyenletek mikrofolyamatokkal való összekapcsolását.

### 3.1. Makroszkopikus deformáció és mikrofolyamatok közötti kapcsolat

Adott  $X$  plasztikus állapot mikroszkopikus szempontból valamilyen határozott szerkezeti elrendeződést (diszlokáció, szemcsehatár eloszlást, stb.) jelent egy adott esetben. Tegyük fel, hogy létezik egy sor  $\xi_1, \dots, \xi_n$  belső paraméter, amelyek  $d\xi_1, \dots, d\xi_n$  megváltozásai jellemzik az állapot  $dX$  megváltozásakor a lokális átrendeződéseket. Akkor az előzőekben bevezetett termodinamikai potenciálok felhasználásával a diszlokációra ható termodinamikai erő [39, 40] analógiájára definiálhatunk egy sor, a  $\xi_i$  változókhoz konjugált „erőt” a következőképpen (állandó hőmérsékleten):

$$\sum_{\alpha} f_{\alpha}(\tilde{\varepsilon}, X) d\xi_{\alpha} = -[\Phi(\tilde{\varepsilon}, X + dX) - \Phi(\tilde{\varepsilon}, X)] = -d^p\Phi, \quad (42)$$

vagy

$$\sum_{\alpha} f_{\alpha}(\tilde{\sigma}, X) d\xi_{\alpha} = [\Psi(\tilde{\sigma}, X + dX) - \Psi(\tilde{\sigma}, X)] = d^p\Psi, \quad (43)$$

mert (32) alapján  $d^p\Phi = -d^p\Psi$ . Itt  $\Psi$  és  $\Phi$  most a vizsgált test  $V$  térfogatára vonatkozik.

(37) és (43) felhasználásával egy alapvető összefüggést nyerünk, amely összekapcsolja a makroszkopikus deformáció plasztikus növekményét a mikroszerkezeti átrendeződésekkel a következőképpen:

$$d^p\varepsilon_{ij} = \frac{1}{V} \sum_{\alpha} \frac{\partial f_{\alpha}(\tilde{\sigma}, X)}{\partial \sigma_{ij}} d\xi_{\alpha}. \quad (44)$$

Az  $1/V$  faktor azt fejezi ki, hogy a lokális átrendeződéseknek az átlagértéke jelentkezik a makroszkopikus deformációban.



Legyen a rugalmas állandók deformációfüggése elhanyagolható, akkor

$$\varepsilon_{ij} = M_{ijkl}\sigma_{kl} + e_{ij}^p(X).$$

Ezt felhasználva (33) integrálásával megkaphatjuk a  $\Psi$  függvényt mint a feszültség függvényét:

$$\Psi = -\Phi_0(X) + V\sigma_{ij}e_{ij}^p(X) + \frac{1}{2}M_{ijkl}\sigma_{ij}\sigma_{kl}, \quad (45)$$

ahol felhasználtuk, hogy (32) alapján  $\sigma_{ij}=0$  esetén  $\Psi_0 = -\Phi_0$ .  $\Phi_0$  a  $\sigma_{ij}=0$  esetén a plasztikus állapot következményeként visszamaradó (locked in) szabadenergia.

(45)-öt (43)-ba helyettesítve:

$$\sum_{\alpha} f_{\alpha}(\tilde{\sigma}, X) d\xi_{\alpha} = -d\Phi_0(X) + V\sigma_{ij}de_{ij}^p(X). \quad (46)$$

Ennek az egyenletnek érvényesnek kell lennie adott  $dX$  állapotváltozáshoz tartozó bármilyen  $d\xi_{\alpha}$ -k esetén, amiből következik, hogy az  $f_{\alpha}$  erők a feszültségnek lineáris függvényei, azaz

$$f_{\alpha} = f_{\alpha}^0(X) + \sigma_{ij} \cdot f_{\alpha,ij}(X), \quad (47)$$

ahol az  $f_{\alpha}^0$  és  $f_{\alpha,ij}$  együtthatók csak a pillanatnyi plasztikus állapot függvényei. Ezzel (44) a jelen közelítésben a következő alakban is felírható:

$$d^p e_{ij} = de_{ij}^p = \frac{1}{V} \sum_{\alpha} f_{\alpha,ij}(X) d\xi_{\alpha}. \quad (48)$$

### 3.1.1. Konjugált erők és krisztallográfiai csúszások

A (44) egyenlet lehetőséget nyújt arra, hogy kapcsolatot találjunk a makroszkopikus plasztikus deformáció növekmény és a krisztallográfiai csúszások, azaz diszlokáció mozgások között. Tegyük fel, hogy az alakváltozást olyan alacsony hőmérsékleten hajtjuk végre, ahol diszlokáció eltűnés nincs és az  $X \rightarrow (X + dX)$  állapotváltozás származzon lokális diszlokáció elmozdulásokból. Legyen egy kiszemelt  $dL$  diszlokáció szakasznak a vonalra merőleges elmozdulása  $dx$ , nyilvánvaló, hogy ez most egy belső paraméter, amely a lokális átrendeződést jellemzi. Az ehhez konjugált erő a diszlokáció hosszegységére ható  $f$  erő, amely függvénye a test pillanatnyi állapotának (belső feszültségeknek, saját feszültségnek [41, 42]), valamint a testen alkalmazott  $\sigma_{ij}$  makroszkopikus feszültségnek. Ezért a (43) kifejezésben most:

$$\sum_{\alpha} f_{\alpha} d\xi_{\alpha} \rightarrow \int_L (f dx) dL,$$

ahol az integrálás a vizsgált testben levő összes diszlokációk hosszára kiterjed. Ezzel az átrendeződés következtében beálló plasztikus deformáció növekmény

$$de_{ij}^p = \frac{1}{V} \int_L \left[ \frac{\partial f(\sigma_{ij}, X)}{\partial \sigma_{ij}} dx \right] dL. \quad (49)$$

A diszlokációra ható erő azonban a következő alakban írható fel:

$$f = f_0(X) + \tau b, \quad (50)$$

ahol  $b$  a Burgers vektor nagysága,  $\tau$  a csúszósíkban a csúszás irányában ható feszültség, amely lineáris függvénye  $\sigma_{ij}$ -nek,  $f_0$  pedig a belső hatásokból származik. Ezt (49)-be helyettesítve

$$d\varepsilon_{ij}^p = \frac{1}{V} \int_L \left[ \frac{\partial \tau}{\partial \sigma_{ij}} b dx \right] dL. \quad (51)$$

Ez az összefüggés kapcsolatot ad az elemi diszlokáció mozgás adatai és a makroszkopikus deformáció növekmény között [12].

További fontos eredményre juthatunk, ha az elemi diszlokáció elmozdulások helyett a lokális nyírásokat vezetjük be belső paraméterként a következő definícióval:

$$d\gamma^{(k)} = \frac{1}{V} \int_{L^{(k)}} [b dx] dL = \varrho^{(k)} b \langle dx \rangle^{(k)}, \quad (52)$$

ahol a  $k$  index meghatározott csúszási rendszer aktiválását jelöli,  $\varrho^{(k)}$  a diszlokáció-sűrűség és  $\langle dx \rangle^{(k)}$  a diszlokációk átlagos elmozdulása. Konjugált erő most az adott csúszási rendszerben a csúszás irányába ható  $\tau^{(k)}$  feszültség, amely hasonló tulajdonságú mint az (50) alatti erő. A plasztikus deformáció növekménye pedig:

$$d\varepsilon_{ij}^p = \frac{1}{V} \int_V \left[ \sum_k \frac{\partial \tau^{(k)}(\sigma_{ij}, X)}{\partial \sigma_{ij}} d\gamma^{(k)} \right] dV. \quad (53)$$

A jobboldali kifejezésben a minta egyes pontjaiban összegezni kell minden aktivált csúszási rendszerre. Az eredmény azt fejezi ki, hogy a makroszkopikus plasztikus deformáció növekménye elemi krisztallográfiai csúszások következménye.

Mivel gondolatmenetünk termodinamikai alapokon nyugszik, ezért (53)-at alkalmazhatjuk arra a makroszkopikus, kontinuum csúszásnak nevezhető határesetre is, amikor a homogén és plasztikusan izotróp test minden pontjában egyidejűleg megindul az alakváltozás. Ez akkor következik be, amikor a feszültségek elérik az

$$f(\sigma_{ij}, X) = \tau_f^2 \quad (54)$$

összefüggéssel definiált folyási felületet (2.3. pont). Ekkor a  $\tau_f$  „erőhöz” konjugált belső paraméter az a tiszta, a (25) egyenlet szerinti értelemben equivalens nyírás, amely az adott helyen a tiszta  $\tau_f$  nyírófeszültség esetén jönne létre. A  $\tau_f$  paraméter az anyag egészére jellemző, ezért a plasztikus deformáció növekmény (53)-ból:

$$d\varepsilon_{ij}^p = \frac{1}{V} \int_V \frac{\partial \tau_f}{\partial \sigma_{ij}} d\gamma dV. \quad (55)$$

Ha a testben a feszültségeloszlás homogén, akkor

$$d\varepsilon_{ij}^p = \frac{1}{V} \frac{\partial \tau_f}{\partial \sigma_{ij}} \int_V d\gamma dV = \frac{\partial \tau_f}{\partial \sigma_{ij}} d\bar{\gamma}, \quad (56)$$

ahol

$$d\bar{\gamma} = \frac{1}{V} \int_V d\gamma dV,$$

az átlagos equivalens nyírás.



Felhasználva (54)-et:

$$d\epsilon_{ij}^p = \frac{\partial f}{\partial \sigma_{ij}} \cdot \frac{1}{2\sqrt{f}} d\bar{\gamma}. \quad (57)$$

Ezzel alapvető fizikai megfontolásokból a krisztallográfiai csúszásokkal összhangban eljutottunk a (17) összefüggés levezetéséhez. Eredményünkéből következik a merőlegességi feltétel. Ezen túlmenően azt a fontos tőbbletet is tartalmazza, hogy a makroszkopikus deformáció növekmény mindegyik komponense arányos az átlagos equivalens nyírással.

Alkalmazzuk (57)-et a (18) egyidejű csavarásra és nyújtásra. A (24) deformáció vektor abszolút értéke ekkor:

$$|d\epsilon_p| = \sqrt{d\gamma^2 + 3d\epsilon^2} = d\bar{\gamma}. \quad (58)$$

Eredményünk azt mutatja, hogy az irodalomban [31] „equivalens deformációnak” nevezett

$$d\bar{\epsilon} = \sqrt{\frac{2}{3} d\epsilon_{ij}^p \cdot d\epsilon_{ij}^p} = \frac{d\bar{\gamma}}{\sqrt{3}} \quad (59)$$

mennyiség egyidejű csavarás és nyújtás esetén éppen az átlagos nyírásnak megfelelő egyenértékű nyúlási deformációval egyenlő (2.3. pont). Ez a magyarázata annak, hogy az (59)-cel definiált kifejezés jellemezheti az összetett feszültségállapot hatására bekövetkező általános alakváltozás hatását.

## 4. EGYKRISTÁLYOK KÉPLÉKENY ALAKVÁLTOZÁSA

### 4.1. A képlékeny alakváltozás geometriája

Az eddigiekben a szilárd testek olyan plasztikus tulajdonságaival foglalkoztunk, amelyek homogénnek és izotrópnak tekinthető testeken, makroszkopikus skálán jelennek meg. A szilárd testek azonban kristályos szerkezetűek, ezért az előző feltételek csak polikristályos testeken valósulhatnak meg. Nyilvánvaló azonban, hogy az alakváltozás mechanizmusa csak a kristályszerkezet figyelembevételével érthető meg. Ezért döntő fontosságú az egykristályok alakváltozásának tanulmányozása.

Ha egykristály próbatestet nyújtási igénybevételnek vetünk alá, azt tapasztaljuk, hogy az alakváltozás nem homogén és nem izotróp, hanem a kristály egyes részei általában jól meghatározott síkok mentén, jól meghatározott irányban csúsznak el egymáshoz képest. Különösen jól megfigyelhető ez a jelenség a hexagonális szoros illeszkedésű fémeken, így pl. Zn egykristályon (5. ábra). A csúszási síkok a kristály meghatározott kristálytani síkseregéhez tartoznak. A csúszási síkok mentén bekövetkező elcsúszás a kristály felületét lépcsőzetessé teszi, amely mikroszkopikus képen csúszásvonalakban jelentkezik. Az egymás mellett kialakuló csúszásvonalak sokaságát csúszási sávnak nevezzük. Az egyes csúszási sávok között viszonylag széles, csúszás nélküli tartományok alakulnak ki.

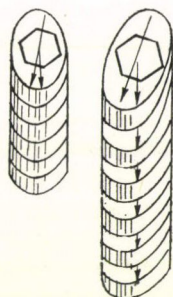
A csúszás a hexagonális fémek esetén a legkönnyebben a (001) bázislap mentén történik. A csúszás iránya nem lehet tetszőleges, hanem mindig a három hatszögátló valamelyikének irányában mutat (6. ábra).

Nagyszámú vizsgálat eredménye mutatja azt [43], hogy a csúszás általában azon síkok mentén történik, amelyekben az atomok a legszorosabban illeszkednek egymáshoz. Jelenleg az alakváltozás mechanizmusáról legtöbbet a felületcentrálalt köbös (fcc) szerkezetű fémek esetén tudunk. A következőkben csak ezzel az anyaggal foglalkozunk.

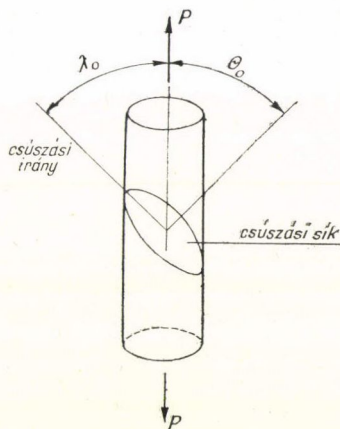
A felületcentrálalt köbös kristály sok előnyös tulajdonsággal rendelkezik a többi kristályszerkezethez képest. Ehhez a szerkezethez egyszerű primitív rács rendelhető, amelyben egy cella egy atomot tartalmaz. Jól modellezhető rugalmas gömbökkel, így pl. a buborék-moddal, ami az alakítás mechanizmusában fontos szerepet játszó kristályhibák tulajdonságainak megértését megkönnyíti.



5. ábra. Csúszási sávok Zn egykristályon



6. ábra. Csúszási síkok és irányok a hatszöges rendszerben



7. ábra. A csúsztató feszültség és külső erő közötti összefüggéshez

A tapasztalat azt mutatja, hogy valamely csúszási rendszerben a csúszás megindulása akkor következik be, ha a csúszás irányába ható feszültség jól definiált értéket ér el. Bizonyos esetekben ez az ún. kritikus csúsztató feszültség (critical resolved shear stress) az anyagra jellemző érték és független a kristály orientációjától (Schmid törvény 1924 [44]). Ebből következik, hogy az alakváltozás megindulásához szükséges külső feszültség nagymértékben függ a feszültség és a kristály kölcsönös orientációjától. Ha nyújtási igénybevétel esetén a feszültség iránya a csúszási sík normálisa, illetve a csúszás iránya közötti szög  $\lambda_0$ , illetve  $\Theta_0$ , akkor a  $P/q_0$  külső feszültség és a  $\tau_r$  csúsztató feszültség kapcsolata a 7. ábra alapján:

$$\tau_r = \frac{P}{q_0} \cos \lambda_0 \cdot \cos \Theta_0. \quad (60)$$

Jól hőkezelt egykristályok  $\tau_r$  kritikus csúsztató feszültsége általában  $10^{-4} - 10^{-5} \mu$ , ahol  $\mu$  a nyírási rugalmassági modulusz.

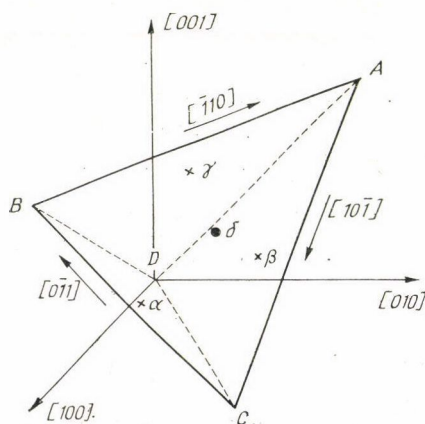


## 4.2. Fck kristályok csúszási rendszerei

A felületcentrált köbös kristályok csúszási rendszereinek áttekintése a Thompson-féle tetraéder [45], vagy a sztereografikus háló segítségével történhet. A Thompson tetraéder definíció szerint egy olyan szabályos tetraéder, amelynek lapjai párhuzamosak a szoros illeszkedésű síkokkal és így megadják a négy lehetséges csúszási síkrendszert, az élei pedig a 12 lehetséges csúszási irányt rögzítik le. Mindegyik csúszási irány két csúszási síkhoz tartozik, ezért összesen 24 különböző csúszási rendszer létezik. Egy ilyen tetraédert a kristályhoz rögzített koordináta-rendszerben akkor kapunk, ha az  $A B C D$  csúcspontokat az  $\frac{a}{2} (011)$ ,  $\frac{a}{2} (101)$ ,  $\frac{a}{2} (110)$  és a  $(000)$

pontokban vesszük fel (8. ábra), ahol  $a$  a kristály rács állandója. Az  $A B C D$  csúcspontokkal szembeni  $a, b, c, d$ , lapok középpontjait  $\alpha, \beta, \gamma, \delta$ -val szokták jelölni.

A sztereografikus háló meghatározása a következőképpen történik. Felveszünk egy félgömböt a kristályban, s a különböző kristálytani irányokhoz, azaz a különböző Miller indexű síkseregek normálisaihoz tartozó dőléspontokat a félgömb egyenlítői síkjára vetítjük úgy, hogy a dőléspontokat összekötjük az egyenlítői síkra merőleges átmérő ellenkező oldali végpontjával. Az így kapott szakasz és az egyenlítői sík metszéspontja lesz a kérdéses síksereget ábrázoló pont, az ún. póluspont. Felületcentrált köbös kristály esetén az  $(100)$  síkot választhatjuk pl. egyenlítői síknak. A sztereografikus hálót ezután úgy kapjuk, hogy a félgömböt 24 egyenlő gömbi háromszögre osztjuk az  $\{100\}$ ,  $\{110\}$  és  $\{111\}$  síkok póluspontjaival (9. ábra). Valamennyi gömbi háromszög kitüntet egy-egy csúszási rendszert a következő értelemben. Ha egykristályt egyszerű nyújtásnak vetünk alá, akkor a külső feszültség iránya szintén egy póluspont lesz, amely valamelyik háromszögben helyezkedik el. Adott háromszögön belüleső bármely pont esetén a legnagyobb feszültség mindig ugyanabban a csúszási rendszerben lép fel. Ilyenkor többnyire csak egy csúszási rendszerben van elcsúszás, ezért ezt a folyamatot egyszeres csúszásnak is szokás nevezni. Ha a külső feszültség irányát egy határvonal, vagy egy csomópont közelébe eső pont jellemzi, akkor egyidejűleg több csúszási rendszerben közel azonos feszültség működhet, más szóval egyidejűleg több csúszási rendszer aktiválódik. Ilyenkor többszörös



8. ábra. A Thompson tetraéder

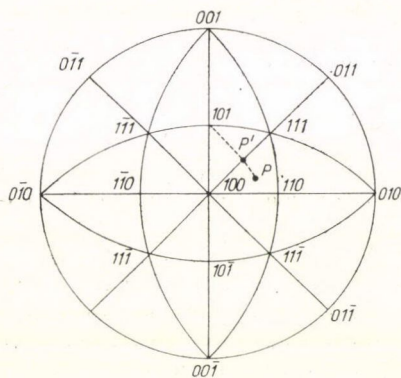
csúszásról beszélünk. A Thompson tetraéder és a sztereografikus háló egy-egy értelműen jellemzi a csúszási rendszereket. Pl. az  $(100)$ ,  $(110)$  és  $(111)$  csúcspontú háromszögben az aktiválódó csúszási rendszer az  $(11\bar{1})$ ,  $[101]$  adatokkal jellemezhető, amely a Thompson tetraéder esetén a  $c$  lapnak és a  $\overline{DB}$  iránynak felel meg. Az adott külső feszültség esetén ezt nevezzük primer csúszási rendszernek. A tapasztalat szerint az alakítási keményedés előrehaladásával további csúszási rendszerek is aktiválódnak. Előfordulhat, hogy a csúszás iránya változatlan marad, de a csúszás a primer rendszerből egy másik rendszerbe megy át. Ezt a folyamatot keresztcsúszásnak nevezzük. Pl. az előbbi primer csúszási rendszer keményedésének eredménye-



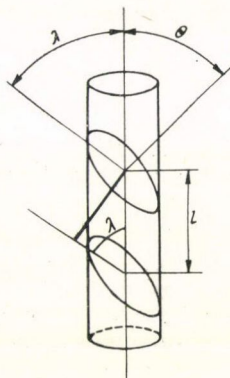
ként **DB** irányú keresztcsúszás aktiválódik az  $(1\bar{1}\bar{1})$  azaz az **a** tetraéderlapnak megfelelő síkokon.

Az egykristályok alakváltozási mechanizmusának vizsgálatakor alapvető fontosságú az aktivált csúszási rendszerek ismerete, azaz annak meghatározása, hogy a primer rendszer mellett még milyen más csúszási rendszerekben alakul ki számottevő elcsúszás.

Az alakváltozás folyamán a csúszási rendszerek és a húzó erő relatív orientációja változik. Ha a csúszás csak egy rendszerben történik, akkor a húzás irányának póluspontja a csúszási irány pontja felé mozog, más szóval az alakítás hatására a csúszási irány egyre közelebb kerül a húzási irányhoz. Pl. ha az aktivált csúszási rendszer



9. ábra. Köbös kristály sztereografikus vetülete az (100) síkon



10. ábra. A csúszási síkok relatív elfordulása alakváltozás során

$(11\bar{1})$ ;  $[101]$ , azaz a húzás irányát a  $P$  pont adja meg (9. ábra), akkor az alakítás során  $P$  a  $P'$  felé mozog. Az ilyen egyszeres csúszás esetében a  $\tau$ , kritikus csúsztató feszültség és a csúszási síkok mentén kialakuló  $\gamma$ , nyírási deformáció egyszerűen kifejezhető a kezdeti  $\lambda_0$  és  $\Theta_0$  paraméterekkel, valamint az  $\varepsilon$  relatív megnyúlással. Ugyanis a csúszási síkok területe, továbbá a csúszási sík pontjainak a csúszási irányra merőleges távolsága a deformáció során nem változik, ezért a 10. ábra alapján egyszerűen adódnak az alábbi összefüggések

$$\frac{\cos \Theta_0}{\cos \Theta} = 1 + \varepsilon; \quad \frac{\sin \lambda_0}{\sin \lambda} = 1 + \varepsilon.$$

Felhasználva még a  $\sigma d\varepsilon = \tau_r d\gamma_r$  plasztikus munkára vonatkozó egyenlőséget, az alábbi kifejezésekhez jutunk:

$$\tau_r = \frac{P}{q_0} \cos \Theta_0 \sqrt{(1 + \varepsilon)^2 - \sin^2 \lambda_0}, \quad (61)$$

$$\gamma_r = \frac{1}{\cos \Theta_0} [\sqrt{(1 + \varepsilon)^2 - \sin^2 \lambda_0} - \cos \lambda_0]. \quad (62)$$



Ha az alakítás előrehaladásával a  $P$  pont eléri  $P'$ -t, azaz az  $[100]$ ,  $[111]$  pontokat összekötő vonalat, akkor az  $(11\bar{1})$ ;  $[101]$  primer csúszási rendszerben és az  $(1\bar{1}1)$ ,  $[110]$  ún. konjugált rendszerben működő csúsztató feszültség egyenlő lesz és kétszeres csúszás alakul ki. A kísérleti tapasztalat szerint a primer csúszás során, mielőtt a  $P$  pont elérné az  $[100]$ ,  $[111]$  vonalat, a konjugált rendszerben is fellép keményedés [46]. Mivel ez egy aktiválatlan csúszási rendszerben lép fel, ezért latens keményedésnek nevezik. Bizonyos esetekben, pl. Al esetén, ez a latens keményedés jó közelítéssel egyenlő a primer rendszerbelivel, s ilyenkor a csúszás mindkét rendszerben azonos mértékű. Ekkor szimmetrikus kettős csúszás alakul ki.

Többszörös csúszás esetén az orientációváltozás többnyire kisebb mértékű. Az alakítás során fellépő orientációváltozás vizsgálata azonban általában lehetőséget ad az egyes aktivált rendszerekben kialakuló csúszások felismerésére.

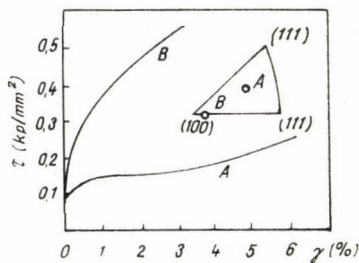
### 4.3. Alakítási keményedés

A tapasztalat szerint a  $\tau_c$  kritikus csúsztató feszültség az aktivált csúszási rendszerben függ az előzetes alakítás  $\gamma$ , mértékétől. A képlékeny alakváltozás mechanizmusának megértésében döntő szerepet játszik az egykristályok  $\tau_c = \tau_c(\gamma_c)$  összefüggésének elméleti értelmezése. A következőkben röviden áttekintjük a legfontosabb kísérleti eredményeket.

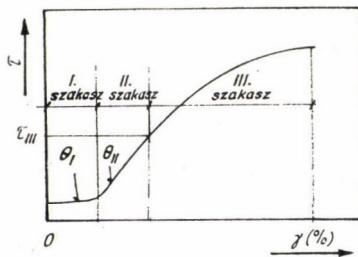
A kísérletek azt mutatják, hogy az alakítási keményedés sebessége,  $d\tau_c/d\gamma$ , számos paramétertől függ. Ilyen paraméterek az alakítás hőmérséklete és sebessége, az alakítás mértéke, továbbá az aktivált csúszási rendszer orientációja. Ez utóbbi esetben lényeges megállapítás az, hogy a primer csúszási rendszerben a kritikus csúsztató feszültség egy sor anyag esetén (pl. Al, Zn) jó közelítéssel csak az ebben a rendszerben kialakuló nyírási deformációtól függ [43, 47, 48].

A 11. ábra alumínium egykristály feszültség-deformáció görbéjét mutatja két különböző orientációjú terhelés esetén [49]. Az  $A$  pontbeli nyújtási tengely esetén egyszeres csúszás alakul ki, amelynek során a csúsztató feszültség csak nagyon lassan nő. Ezt a csúszást ezért könnyű csúszásnak is nevezzük. A  $B$  pontbeli húzási tengely esetén az alakváltozás már kezdettől fogva többszörös csúszással megy végbe, s a feszültség a deformációtól parabolikusan függ.

A felületcentrált köbös egykristályok alakítási keményedésének menete nem túl alacsony hőmérsékleten általában három jellegzetes szakaszra osztható (12. ábra).



11. ábra. Al egykristály feszültség-deformáció görbéi. Az  $A$  görbéhez egyszeres, a  $B$  görbéhez többszörös csúszás tartozik [49]



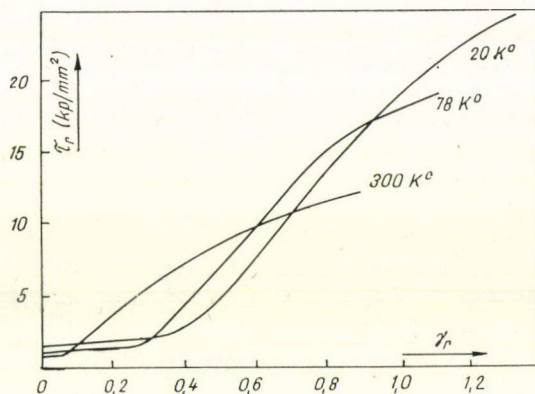
12. ábra. Fek kristályok alakítási keményedésének szakaszai

Az első szakasz az egyszeres vagy könnyű csúszás tartománya. Ez természetesen csak akkor figyelhető meg, ha a húzás iránya valamely háromszög belsejébe esik. Jellegzetessége ennek a szakasznak, hogy a keményedés mértéke igen kicsi. A  $\tau_r(\gamma_r)$  függvényt definíció szerint lineárisnak szokás venni, bár a görbe pontosan S alakú, azonban legnagyobb része valóban jó közelítéssel egyenesnek vehető. A  $d\tau_r/d\gamma_r$  irántangens kb.  $2 \cdot 10^{-4} \mu$  nagyságú, de értéke függ a kristály orientációjától [50]. Általában akkor a legkisebb, ha a kristály és a külső feszültség olyan orientációjú, hogy a csúsztató feszültség a konjugált csúszási rendszerben kicsi. Ha a keményedés sebessége minimum, akkor az ebben a szakaszban elérhető deformáció maximum [51].

Az alakváltozás növekedésével — egy átmeneti tartomány után — az alakítási keményedés második szakasza alakul ki. Elektronmikroszkópos vizsgálatok azt mutatják, hogy az átmeneti tartományban a csúszás fokozatosan kiterjed a konjugált és a kritikus csúszási rendszerekre is. A II. szakaszban ezért többszörös csúszás alakul ki. A folyási feszültséget ismét definíció szerint  $\gamma_r$  lineáris függvényének tekintjük, azaz

$$\tau_r = \Theta_{II}(\gamma - \gamma_{II}), \quad (63)$$

ahol  $\Theta_{II}$  értéke általában kb.  $\frac{\mu}{300}$  és  $\gamma_{II}$  állandó. A második szakasz kezdetén és végén fellépő átmeneti tartományoktól eltekintve ez az összefüggés nagyon jó közelítéssel igaz.



13. ábra. A feszültség-nyírási deformáció görbe hőmérséklet függése nagy tisztaságú Ni egykristály esetén [51]

Az egyes szakaszokban kialakuló csúszásvonalak elektronmikroszkópos vizsgálata fontos megfigyeléseket tesz lehetővé. A II. szakaszban a csúszási sávok jellegzetes sajátosságokat mutatnak. Egyrészt a csúszási sávok kiszélesednek, másrészt az egyes sávok nagy részében az alakváltozás megszakítása után a csúszás ismét aktiválódik új csúszási sávok kialakulásával együtt [48].

Az aktiválódó csúszás vonalak  $L$  hossza növekvő alakváltozással csökken



a következőképpen [43]:

$$L = \frac{A}{\gamma - \gamma_0}, \quad (64)$$

ahol  $A$  és  $\gamma_0$  az anyagra jellemző állandók.  $A$  értéke rézre kb.  $4 \cdot 10^{-4}$  cm és  $\gamma_0 \approx \gamma_{II}$ .

A  $\tau_{III}$  feszültség elérése után egy újabb, a III. szakasz aktiválódik. Ebben a szakaszban a feszültség és deformáció közötti összefüggés parabolikusnak tekinthető, azaz többnyire a

$$\tau_r = \Theta_{III} \gamma^{1/2} + \tau_{r3} \quad (65)$$

alakban adható meg, ahol  $\Theta_{III}$  és  $\tau_{r3}$  az anyagra jellemző állandók [43, 48, 51].

Az elektronmikroszkópos vizsgálatok ebben az esetben nem olyan széleskörűek és nem mutatnak olyan világos képet, mint az I. és II. szakasz esetén. A csúszási sávok ebben a szakaszban eldurvulnak, továbbá az aktivált rendszerekben megfigyelhető egyszeri csúszások mellett mind nagyobb mértékű keresztcsúszások alakulnak ki. Ez utóbbi folyamaton nem a keresztcsúszási rendszerben aktivált csúszás értendő, hanem a primer rendszerben kialakuló csúszásnak a keresztcsúszási rendszerben való folytatása.

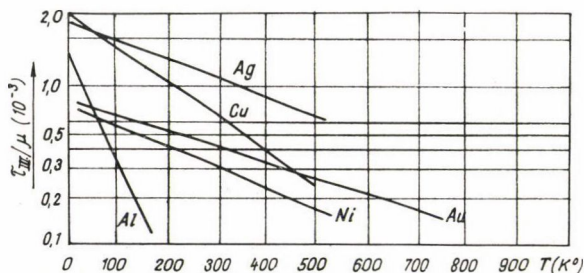
#### 4.3.1. A hőmérséklet hatása a feszültség-deformáció görbére

A feszültség-deformáció görbe tulajdonságai általában jelentősen függenek a hőmérséklettől. A 13. ábra nagy tisztaságú nikkel egykristály 20, 78 és 300 K<sup>o</sup>-on kapott görbéit mutatja. Látható, hogy a  $\tau_{0r}$ , az egyszeres csúszás megindításához szükséges kritikus csúsztató feszültség, csak kismértékben változik. Az I. és II. szakaszhoz tartozó iránytangens gyakorlatilag nem változik, a  $\tau_{III}$  feszültség, azaz a III. szakasz kezdete azonban növekvő hőmérséklettel jelentősen csökken. A kísérletek általában azt mutatják, hogy  $\Theta_I/\mu$  és  $\Theta_{II}/\mu$  közelítőleg állandó, más szóval  $\Theta_I$  és  $\Theta_{II}$  csak a rugalmas állandókon keresztül függ a hőmérséklettől. A kritikus csúsztató feszültség csekély hőmérsékletfüggése általában a nagy tisztaságú fémek tulajdonsága [43, 48, 51].

A harmadik szakasz kialakulásában azonban a hőmérsékleti hatásoknak mindig igen jelentős szerepük van, mert valamennyi felületcentrált köbös fém esetén nagymértékben függ a hőmérséklettől. A 14. ábra alapján ez a függés jó közelítéssel exponenciális, azaz [48]:

$$\tau_{III} = \tau_{III}(0) \cdot e^{-BT}, \quad (66)$$

ahol  $\tau_{III}(0)$  és  $B$  állandók.



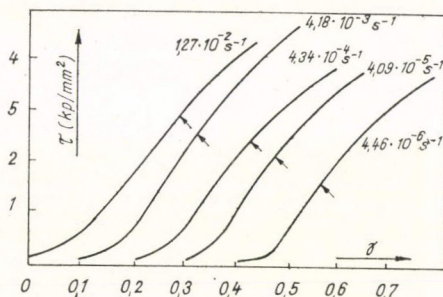
14. ábra.  $\tau_{III}/\mu$  hőmérsékletfüggése fémek esetén [48]

A III. szakaszban kialakuló folyamatoknak a termikus aktiválásokkal való szoros kapcsolatát mutatják azok a kísérletek is, amelyek szerint nagyon alacsony hőmérsékleten a III. szakasz meg sem jelenik. Pl. réz egykristályt  $4,2\text{ K}^\circ$ -on deformálva,  $\gamma_r=1,5$  deformációig a feszültség-deformáció görbe lineáris marad [52].

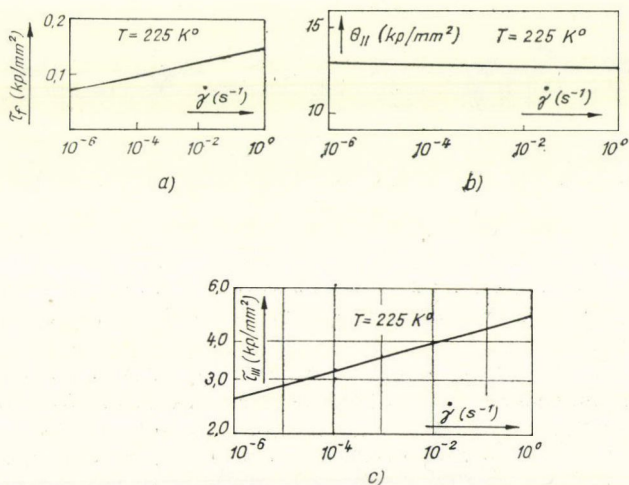
#### 4.3.2. Az alakítási sebesség hatása

Az alakítási keményedést jellemző egyes paraméterek általában függenek az alakítás sebességétől. Ilyen paraméterek elsősorban azok, amelyek termikusan aktivált folyamatokkal kapcsolatosak.

A termikusan aktivált folyamatok egy-egy elemi lépése energia fluktuációval kapcsolatos. Egy-egy elemi lépés bekövetkezése emiatt meghatározott, átlagos várakozási időt igényel. Várható ezért, hogy azok a folyamatok és paraméterek lesznek sebességfüggők, amelyek a hőmérséklettől is jelentősen függenek. Ilyen paraméter pl. a III. szakasz megindulásához tartozó  $\tau_{III}$  feszültség, amely növekvő alakítási sebességgel nő. A 15. ábra mutatja az alakítás sebességének hatását a szobahőmérsékleten alakított rézegykristály feszültség-deformáció görbéjére standard ([100], [111], [110] csúcspontú háromszögbe eső) orientáció esetén [48]. A jellemző paraméterek változásának mértékét szemléltetik jellegzetes példaként a 16. a, b, c. ábrák.



15. ábra. Az alakítási keményedés függése a deformáció sebességétől Cu egykristály esetén. Az egyes görbék melletti számok a nyírási alakváltozás sebességét adják meg, a nyilak a  $\tau_{III}$  értékét jelzik [48]



16. ábra.  $\tau_f$ ,  $\Theta_{II}$  és  $\tau_{III}$  függése az alakítás sebességétől [48]



Látható, hogy réz esetén a kritikus csúsztató feszültség és  $\tau_{III}$  változása növekvő alakítási sebességgel jelentős, és jó közelítéssel logaritmus függvényvel adható meg. A II. szakasz  $\Theta_{II}$  paramétere gyakorlatilag hőmérséklet-független. Hasonló megfigyelések adódtak más felületencentrált köbös fémekre is [48].

#### 4.4. Polikristályok képlékeny alakítása

A gyakorlatban felhasznált anyagok csak igen ritkán egykristályok. A kristályos testek általában nagyszámú, különböző méretű kristályszemcséből állnak. Ha külső erő hat egy ilyen polikristályos testre, akkor a különböző szemcsék csúszási rendszereinek orientációja a külső erőhöz képest jelentősen eltér. Az egyes szemcsék csúszási rendszereiben működő csúsztató feszültség értéke ezért nagyon különböző lesz. A kritikus csúsztató feszültség és a külső erő között ekkor nem írható fel a (60) egyszerű kifejezés. Definiálhatjuk azonban az

$$m = \frac{1}{\cos \Theta_0 \cdot \cos \lambda_0}$$

orientációs tényező átlagértékét a következőképpen [4]:

$$\bar{m} = \frac{\int N(m) m dm}{\int N(m) dm}, \quad (67)$$

ahol  $N(m)$  azon szemcsék száma, amelyekben a csúszási rendszer valamelyikének orientációja az  $m$  tényezővel adható meg és az integrálást az összes szemcsére ki kell terjeszteni. Ezzel a külső feszültség és az egyes szemcsékben működő átlagos csúsztató feszültség közti összefüggés

$$\sigma = \bar{m} \tau_r. \quad (68)$$

Ezt és a plasztikus munkára vonatkozó

$$\sigma d\varepsilon = \tau_r d\gamma_r \quad (69)$$

egyenlőséget felhasználva, a nyúlási és nyírási deformáció között az alábbi kifejezés adódik:

$$\gamma_r = \int \bar{m} d\varepsilon.$$

Ha  $\bar{m}$  nem függ a deformációtól, akkor

$$\gamma_r = \bar{m} \varepsilon. \quad (70)$$

A (68) és (70) összefüggések felhasználásával kapcsolatot találhatunk az egykristályok és a polikristályok tulajdonságai között. Ehhez szükség van az  $\bar{m}$  explicit meghatározásához.

A polikristályos test egy szemcséjének lehetséges alakváltozását a szomszédjai nagymértékben befolyásolják. Ezért az egyes szemcsék alakváltozását a legáltalánosabban kell meghatároznunk. A legáltalánosabb alakváltozás öt különböző csúszási rendszerben végbemenő csúszással történhet meg. Ez onnan következik, hogy képlékeny alakváltozás esetén a deformációs tenzor hat független komponenséből a térfogat változatlanásával egynek az értékét lerögzítettük.

A polikristályos fémek szemcséiben az előzők alapján csak többszörös csúszás alakulhat ki. Ezért az alakítási keményedés I. szakasza polikristályos testeken sohasem figyelhető meg. A polikristályos fémek nyújtási feszültség-deformáció görbéje általában jó közelítéssel parabolikus függvénnyel közelíthető.

#### 4.5. Az alakítási keményedés elméletéről

A kristályos testek képlékeny alakváltozása diszlokáció mozgással megy végbe. A diszlokációk tulajdonságainak tárgyalására itt most nem térünk ki. A problémakörnek ma már rendkívül széleskörű irodalma van, ezért inkább csak példaként idézünk néhány összefoglaló művet az irodalomból [4, 5, 15, 35, 53, 54], és utalunk a jelen szerző összefoglaló munkáira [34, 55—59].

Az alakítási keményedés elméleti megértéséhez a diszlokáció mozgást akadályozó hatások pontos számításbavételére van szükség. Az eddigi elméletek mindegyike tartalmaz a valóságnak megfelelő elemeket, azonban egységes leírását egyik sem adja a megfigyelt jelenségeknek.

Az alakítási keményedés elméletének megalapozása nyilvánvalóan igényli a diszlokációk csúszási és egymással való kölcsönhatási mechanizmusainak részletes ismeretét. Nagyon sok diszlokációs mechanizmust meg lehetett állapítani közvetlen megfigyelések nélkül is, ezért tűntek biztatónak az első elméletek [43, 60—62], amelyek részletes áttekintésével két konferencia is foglalkozott [63, 64]. A közvetlen megfigyelések azonban sokáig a valóságtól jelentősen eltérő képet mutathattak csak, mert az alakítást követő preparálási technika a diszlokáció szerkezetben jelentős változásokat okozott [65]. Ennek elkerülése csak úgy valósítható meg, ha alkalmas eljárással az adott alakítás utáni, vagy még a külső feszültség hatása alatti diszlokáció szerkezetet lerögzíthetjük. Ilyen eljárásnak bizonyult tiszta fémek esetén az alacsony hőmérsékleti besugárzás deformáció utáni alkalmazása, amelynek során keletkező pont hibák a diszlokációkat lerögzítik [66]. Ennek a technikának köszönhető, hogy az elmúlt 10 évben végzett transzmissziós elektronmikroszkópos vizsgálatok feltárták az alakításkor kialakuló tényleges diszlokáció elrendezést mind leterhelt [66—69], mind terhelés alatt tartott próbatestek esetén [70]. Nagyon jelentős különbségek az egész diszlokáció elrendeződésben nem adódnak ugyan a rögzített és a rögzítetlen eset között, azonban egy általános megfigyelés az, hogy az utóbbi esetben a szabad (magányos, azaz diszlokáció hálóval nem stabilizált) és a lokális feszültségek hatására kihajlott alakú diszlokációk — szemben a másik esettel —, szinte egyáltalán nem figyelhetők meg [71]. A szabad diszlokációk eltűnése érthető és bár ezek kb. csak a 10 %-át teszik ki a teljes diszlokáció sűrűségnek, mégis úgy tűnik, hogy ezek fontos információkat jelentenek az alakváltozás folyamatának megértésében [71]. A következőkben röviden áttekintjük az alakítási keményedés egyes szakaszaira ismert, jellemző megfigyeléseket.

##### 4.5.1. Diszlokáció elrendeződés az egyes szakaszokban

A rögzített diszlokáció szerkezetre vonatkozó vizsgálatok megmutatták, hogy már az első szakaszban nagyobb sűrűségű, éldiszlokáció multipólusokból álló tartományok (diszlokáció kötegek) alakulnak ki a primer csúszási rendszerben (pl. az (111) síkban a primer,  $\mathbf{b} = \frac{1}{2} [\bar{1}01]$  Burgers vektorú diszlokációkból).



A II. szakaszban már komplikáltabb szerkezet alakul ki, mert a szekunder csúszási rendszereken is bekövetkezik diszlokáció mozgás. Általában megmaradnak a primer multipólus kötegek, azonban sűrűbbek és kevésbé szabályosak lesznek, továbbá tartalmaznak szekunder diszlokációkat is [70]. A szekunder diszlokáció mozgás elsősorban belső feszültség-koncentrációk környezetében, tehát primer diszlokáció csoportok környezetében alakul ki. A folyamat eredményeként komplikált diszlokáció háló jön létre, amely közelítőleg párhuzamos a primer csúszási síkkal és primer, valamint szekunder diszlokációkat (illetve ezek reakciótermékeit, pl. Lomer-Cottrell diszlokációkat [34]) tartalmaz. Lomer-Cottrell „rögzült” diszlokáció szakaszok keletkeznek pl. a primer diszlokációk és a  $(\bar{1}11)$ ,  $[011]$  konjugált csúszási rendszerbeli diszlokációk reakciója révén. Az így kialakuló réteges, cellás szerkezetű diszlokáció „rácsok” a további diszlokáció mozgást akadályozzák. A rácsok réteges szerkezete alacsony hőmérsékleten erősebben jelentkezik.

A transzmissziós elektronmikroszkópos megfigyelések szerint a deformáció sebességének a  $10^{-4}$ – $10^4$  s $^{-1}$  intervallumban a diszlokáció elrendezésre nincs lényeges hatása [72], szemben a makroszkopikus mechanikai tulajdonságokkal. Ennek valószínűleg az az oka, hogy a primer csúszási rendszert metsző szekunder „erdő” diszlokációk — amelyek a primer diszlokáció mozgást jelentősen akadályozzák —, a diszlokációfalakban sűrűsödnek és emiatt nem figyelhetők meg [71].

Nem mutatható ki lényeges különbség a diszlokáció szerkezetben az alakítási keményedés II. és III. szakasza között sem [66, 73, 74]. A megfigyelések szerint a diszlokáció elrendezés jellege nem változik, csak a jellemző méretekben (a diszlokációfalak és cellák mérete, az átlagos szabad diszlokációhossz a kötegekben, stb.) következik be monoton csökkenés.

Mindezek a megfigyelések egyik jelenleg ismert elméletet sem támasztják egyértelműen alá, hanem azt mutatják, hogy több különböző mechanizmus (hosszútávú belső feszültségek hatása [43, 65], lépcsők képződése [61, 62], „erdő” diszlokációk átmetszése [75], a diszlokáció „rács” szerkezetének hatása [60], stb.) egyidejű eredménye jelentkezik.

#### 4.5.2. Az alakítási keményedés modellje

Az előzők alapján az alakítási keményedés bonyolult diszlokáció elrendezés eredő hatásaként jelentkezik. Amikor létrehozunk adott alakváltozást a testen, meghatározott diszlokáció koncentrációt alakítunk ki. A diszlokációk feszültségtere a külső feszültséggel együtt létrehoz valamilyen effektív belső feszültséget, amely meghatározott diszlokáció elrendezést eredményez. Ennek beállása után további diszlokáció mozgás — adott külső feszültség esetén — nem megy végbe, az alakváltozás megszűnik. További alakváltozás létrehozásához a külső feszültség növelése szükséges. Ha ez bekövetkezik, akkor újabb diszlokáció mozgás és keletkezés jön létre, s ennek eredményeként ismét beáll egy olyan diszlokáció szerkezet, amelyen az adott külső feszültség további változást már nem okoz. Ezen folyamatok egymást követő sorozata folytonos lokális diszlokáció átrendeződést eredményez, amelynek makroszkopikus megnyilvánulása az alakítási keményedés.

Egy ilyen folyamat pontos leírása csak olyan statisztikus elmélettel valósítható meg, amely korrelált, kooperatív diszlokáció mozgást számításba képes venni. Ilyen elmélet jelenleg nem ismeretes, ezért olyan modellt célszerű csak reálisnak



tekinteni, amely nem használ ki nagy mértékben speciális feltevéseket a keményedés természetére nézve.

Jelen szerző által kidolgozott modell az erdő diszlokációk átmetszéséből adódó hatást veszi számításba úgy, hogy az alakváltozás során keletkező hibakonzentráció növekedést határozza meg [75]. A végeredmény az, hogy mind a ponthiba, mind a diszlokáció koncentráció növekmény a plasztikus munkával arányos. A modell nem használ ki speciális feltevéseket sem a metszési aktus természetére, sem a diszlokációk elrendezésére vonatkozóan, ezért egyaránt érvényes lehet a II. és III. szakaszban. A folyási feszültségre kapott

$$\tau_r = \alpha \mu b^2 \frac{dN}{d\gamma_r} \quad (71)$$

kifejezés — ahol  $\mu$  a nyírási modulusz,  $b$  a diszlokáció Burgers vektorának abszolút értéke,  $N$  a diszlokáció sűrűség,  $\gamma_r$  a csúszósíkok mentén kialakuló nyírási deformáció (resolved shear strain) és  $\alpha$  állandó —, a II. szakaszra vonatkozóan bármely másik elmélet esetén is érvényes. Ugyanis valamennyi elmélet a II., tehát lineáris szakaszra a következő eredményt adja:

$$\tau_r = \alpha_0 \mu b \sqrt{N}, \quad (72)$$

ahol  $\alpha_0$  állandó. Felhasználva a  $d\tau_r = \Theta_{II} d\gamma_r$  összefüggést, (72)-ből (71)-et kapjuk. A (71) összefüggés ezért a II. szakaszban bármilyen mechanizmus esetén érvényes. Mivel az elektronmikroszkópos megfigyelések szerint a diszlokáció szerkezet jellege nem változik meg a III. szakaszban a II-hoz képest, ezért (71) érvényességét modelltől függetlenül kiterjeszthetjük a III. szakaszra is, legalábbis elegendően alacsony hőmérsékleten, ahol jelentős diszlokáció eltűnés nincs.

A következő fejezetben ennek a kiterjesztésnek a helyességét a részletes kísérleti vizsgálatok egyértelműen igazolják.

## II. POLIKRISTÁLYOS FCK FÉMEK ALAKÍTÁSI KEMÉNYEDÉSE NAGY DEFORMÁCIÓK ESETÉN

### 1. BEVEZETÉS

A polikristályos fémek alakítási keményedése, különösen nagy deformációk esetén, jelenleg is csak részlegesen megértett terület. Az előző fejezetekben láttuk, hogy a diszlokáció elmélet segítségével kvalitatív magyarázat adható az alakítási keményedésre a diszlokációk sokszorozódásán, egymással való kölcsönhatásán és egymást rögzítő hatásán keresztül. Nem ismeretes azonban olyan elmélet jelenleg sem, amely egységes és kvantitatív magyarázatát adná az alakítási keményedésnek a különböző mértékű deformációk esetén, különösen polikristályos fémekre, amikor a szemcsehatárok jelenléte a problémát még komplikáltabbá teszi. Ez utóbbi esetben még olyan empirikus formula sem ismeretes az irodalomban, amely a megfigyelt alakítási keményedési görbékhez kielégítően illeszthető lenne.

Az alakítási keményedést polikristályos fémek nagy deformációja esetén alacsony hőmérsékleten eddig csak kevéssé vizsgálták. Ennek egyik oka abban rejlik, hogy a vizsgálatokat többnyire tiszta egytengelyű nyújtás esetén végzik, amikor alacsony



hőmérsékleten a törés már többnyire azelőtt bekövetkezik, mielőtt jelentős mértékű deformáció elérhető lenne. Egy tiszta nyújtási vizsgálatban pl. nem érhető el száz százalék nagyságú deformáció még az igen jól alakítható anyagok esetén sem. Ilyen mértékű deformációk csak csavarással vagy egytengelyű kompresszióval érhetők el.

E fejezet célja azon vizsgálatok eredményeinek az összefoglalása, amelyek a fenti problémák tisztázására az elmúlt tíz évben születtek. Az alakítási keményedésnek csavarási deformációval való vizsgálatára egyszerű módszert dolgoztam ki [76], amelynek alkalmazása a nemzetközi irodalomban is széleskörűen elterjedt [77–88]. A módszerrel végzett első vizsgálatokról számos publikációban számoltunk be [16, 89–91], s az 1966-ig kapott eredményekről összefoglaló áttekintést egy előző dolgozatban adtam meg [92].

Ezekben a dolgozatokban kimutattuk, hogy a csavarási deformáció jól alkalmazható a polikristályos fémek alakítási keményedésének tanulmányozására, ha figyelembe vesszük azt a nyúlási deformációt, ami a csavarási deformációval együtt mindig szükségképpen fellép [76]. Az „ekvivalens nyírási deformáció” fogalmának bevezetésével lehetőség nyílik a különböző fizikai tulajdonságok, pl. az elektromos ellenállás változásának vizsgálatára a deformáció függvényében. A kapott eredményeket több más kutató is igazolta [79, 81–88].

A jelen dolgozatban azokat az eredményeket foglaljuk össze, amelyek a módszer elvi és kísérleti továbbfejlesztése során születtek. Felhasználva az előző fejezetben ismertetett eredményeket, szisztematikus megalapozását adjuk az ekvivalens nyírási deformáció meghatározásának. Ebből kitűnik, hogy az egyidejű csavarás és nyújtásakor fellépő deformáció mértékét jellemző összefüggésben az előzőkhöz képest egy szorzófaktort módosítani kell. A kísérleti módszer első formájában csak relatív feszültségek meghatározására volt alkalmas [90]. A feszültség kompenzáció módszerének alkalmazásával lehetőség nyílt az adott mértékű deformációhoz tartozó folyási feszültség közvetlen mérésére is. Ennek alapján megmutatjuk, hogy a csavarási deformáció alkalmazása lehetővé teszi a feszültség-deformáció görbe egykristályokon mérttel egyenértékű meghatározását igen nagy, nyújtással egykristályon sem elérhető, deformációk esetén is, amivel egy sor új jelenség feltárására nyílik lehetőség. Ezekről az eredményekről a nemzetközi irodalomban is beszámoltam [93].

A következőkben három típusú feszültség-deformáció görbét fogunk összehasonlítani: egykristályok egytengelyű nyújtásakor, polikristályok egytengelyű nyújtásakor, valamint polikristályok egyidejű nyújtása és csavarásakor kapott görbéket. Megkülönböztetésükre római szám indexeket alkalmazunk egykristályok, és latin indexeket polikristályok esetén. Az alakítási keményedés sebességét, az egysegnyi deformáció növekmény hatására bekövetkező feszültségváltozást,  $\theta$ -val jelöljük mindkét anyag nyújtása esetén, míg  $\chi$ -vel polikristályok nyújtása és csavarása esetén.

## 2. POLIKRISTÁLYOK KÉPLEKENY ALAKVÁLTOZÁSA

A következőkben áttekintjük azokat a megfontolásokat, amelyek az ekvivalens nyírási deformáció (resolved shear strain) meghatározásához elvezetnek.



## 2.1. Tiszta egytengelyű nyújtás

A kristályos anyagok képlékeny alakváltozása csúszások által megy végbe. Az I/4. fejezetben láttuk, hogy a csúszás feltétele általában az, hogy egy adott csúszási rendszerben, a csúszási síkban, a csúszási irányban ható feszültség elérjen egy kritikus  $\tau_r$  értéket, az adott csúszási rendszerre vonatkozó csúszási folyáshatárt (resolved shear stress). Ha egykristályt egytengelyű nyújtásnak vetünk alá, akkor az egyszeres csúszás feltétele a következő:

$$\sigma = \frac{1}{\cos \Theta_0 \cdot \cos \lambda_0} \tau_r = m_\sigma(\Theta_0, \lambda_0) \tau_r, \quad (73)$$

ahol  $\sigma$  az alkalmazott külső feszültség,  $\Theta_0$  és  $\lambda_0$  a feszültség iránya és a csúszási sík normálisa, illetve a csúszási irány által bezárt szög. Az egytengelyű nyújtásra jellemző  $m_\sigma$  iránytényezőt Schmid faktornak nevezzük.

Említettük már, hogy polikristály tiszta nyújtásakor a folyás feltételének meghatározásához a (73) összefüggésben a Schmid faktort az összes lehetséges csúszási irányra átlagolni kell. Plasztikus izotrópia feltételezésével az  $\bar{m}_\sigma$  faktor értékét először Taylor [94], majd Bishop és Hill [95] határozták meg. Eredményeik szerint  $\bar{m}_\sigma = 3,06 \cong \cong 3$ . Ezt felhasználva tiszta nyújtáskor egy polikristály folyási feszültsége és az adott csúszási rendszer aktiválásához szükséges csúszási folyáshatár közötti összefüggés:

$$\sigma = \bar{m}_\sigma \cdot \tau_r = 3\tau_r. \quad (74)$$

Összefüggést találhatunk a nyújtási deformáció  $d\varepsilon$  növekménye és az adott csúszási rendszerben aktiválódó csúszásokat jellemző  $d\gamma_r$  nyírási deformáció (resolved shear strain) növekmény között is. A teljes makroszkopikus deformáció ugyanis ilyen tiszta nyírásokból épül fel, ezért az alakítás során végzett munkák egyenlők kell legyenek, azaz

$$\sigma d\varepsilon = \tau_r d\gamma_r. \quad (75)$$

A (74) egyenlet felhasználásával

$$d\gamma_r = \bar{m}_\sigma \cdot d\varepsilon, \quad (76)$$

vagy feltéve, hogy  $\bar{m}_\sigma$  nem változik a deformáció során:

$$\gamma_r = \bar{m}_\sigma \varepsilon = 3\varepsilon. \quad (77)$$

## 2.2. Tiszta csavarás

Tiszta csavaráskor  $\tau$  makroszkopikus nyíró feszültséget alkalmazunk és ez indítja meg a csúszást az egyes csúszási rendszerekben. A csúszás feltétele most is a (73)-hoz hasonló kifejezéssel adható meg, azonban most az előbbtől különböző  $m_\tau$  iránytényező lép fel. Polikristály tiszta csavarásakor ennek átlagértékét kell meghatároznunk az összes lehetséges csúszási rendszerre. Közvetlen ilyen számítás nem ismeretes, azonban eljárhatunk a következőképpen.

A tiszta csavarás kéttengelyű terhelést jelent, ezért alkalmazzuk a Mises folyási feltételt, amely (elhagyva az  $f$  indexet) (13) alapján a következő összefüggésre vezet:

$$\sqrt{3}\tau = \sigma. \quad (78)$$



Ezzel és (74) felhasználásával a csúszási folyáshatár és a makroszkopikus nyírási folyáshatár között az alábbi összefüggés áll fenn:

$$\tau = \sqrt{3} \tau_r. \quad (79)$$

Alkalmazva ismét a plasztikus munkák egyenlőségét, megkaphatjuk az összefüggést a csúszásokat jellemző  $d\gamma_r$  mennyiség és a makroszkopikusan mérhető  $d\gamma_t$  csavarási (nyírási) deformációk közötti összefüggést:

$$d\gamma_r = \sqrt{3} d\gamma_t, \quad (80)$$

vagy integrálás után

$$\gamma_r = \sqrt{3} \gamma_t. \quad (81)$$

### 2.3. Egyidejű csavarás és nyújtás

A makroszkopikus képlékenységi elméletekben a deformációs tenzor írja le a test alakjának megváltozását, s ezen keresztül jellemzi a deformáció mértékét. Ez a leírási mód azonban csak kontinuumnak tekinthető anyag alakváltozásának leírása esetén vezet helyes eredményre. Ugyanis a tenzorjellegből éppen az következik, hogy az anyag bármely pontjának környezetén, bármilyen irányú alakváltozás létrejöhet. Világos azonban, hogy a kristályos anyagokban lokálisan ez nem teljesülhet. Ezért ha a deformáció mértékének megadásával nem a test alakváltozását, hanem az anyag fizikai állapotában bekövetkező változásokat meghatározó összes csúszásokat akarjuk jellemezni, akkor a tenzor-leírást nem alkalmazhatjuk.

Egyidejű csavarás és nyújtás esetén kísérletileg  $d\varepsilon$  nyúlást és  $d\gamma_t$  csavarási deformációt mérhetünk. Ezek a deformációk a (77), illetve (81) összefüggés szerinti csúszások révén következnek be. Világos, hogy nyújtást csak nyúlás irányú, elcsavarodást csak a nyúlás irányára merőleges csúszások alakítanak ki. Ezért a két folyamat egyidejű végbemenetelekor kialakuló összes csúszás ugyanannyi, mintha a két folyamatot tisztán, lépésenként hajtánánk végre.

A fentiek alapján az egyidejű csavarás és nyújtás során bekövetkező deformáció növekmény mértékét az ekvivalens csúszási deformációval jellemezzük, amely (76) és (80) felhasználásával a következő *skalár* mennyiség:

$$d\gamma_r = \sqrt{3} d\gamma_t + 3d\varepsilon. \quad (82)$$

A  $d\varepsilon$  és  $d\gamma_t$  makroszkopikus paraméterek definíciója:

$$d\varepsilon = \frac{dl}{l}, \quad (83)$$

ahol  $l$  a vizsgált (drót alakú) minta hossza és

$$d\gamma_t = \frac{r \cdot d\vartheta_p}{l}, \quad (84)$$

ahol  $r$  a minta sugara és  $d\vartheta_p$  a képlékeny (maradó) elcsavarodási szög.

Csavarási kísérletekben a közvetlenül mérhető mennyiség a (84) összefüggéssel adott. Célszerű ezért ebben az esetben az ekvivalens csavarási deformációt jellemző mennyiséget is bevezetni a következő definícióval:

$$d\gamma = d\gamma_t + \sqrt{3} d\epsilon, \quad (85)$$

ahol  $\sqrt{3}d\epsilon$  a nyúlásból származó ekvivalens csavarási deformáció.

A (82), (85) mennyiségek a (84) csavarási deformáción keresztül a minta sugara mentén nem állandók. Ezért ha olyan fizikai mennyiség változást vizsgáljuk a deformáció függvényében, amely csak az összes csúszástól függ, akkor célszerű a csavarási deformáció mértékét a minta keresztmetszetére vett átlagértékkel jellemezni a következő definíció szerint:

$$\overline{d\gamma_t} = \frac{d\vartheta_p}{a^2 \pi l} \int_0^a 2\pi r^2 dr = \frac{2}{3} \frac{a d\vartheta_p}{l}, \quad (86)$$

ahol  $a$  a minta külső sugara. Ezzel az átlagos csavarási deformációt véges elcsavarodási szög esetén a következő kifejezés adja meg:

$$\bar{\gamma}_t = \frac{2}{3} \int_0^{\vartheta_p} \frac{a(\vartheta'_p) \cdot d\vartheta'_p}{l(\vartheta'_p)}. \quad (87)$$

Felhasználva, hogy a képlékeny alakváltozás a minta térfogatát csak elhanyagolható mértékben változtatja meg, a minta bármely pillanatnyi  $l$  hossza és a sugara esetén

$$la^2 = l_0 a_0^2, \quad (88)$$

ahol  $l_0$ ,  $a_0$  a minta kezdeti hossza és sugara. Ezzel a (87) kifejezés a következő alakban írható fel:

$$\bar{\gamma}_t = \frac{2}{3} \frac{a_0 \vartheta}{l_0}, \quad (89)$$

ahol

$$\vartheta = \int_0^{\vartheta_p} \frac{d\vartheta'_p}{\left[1 + \frac{\Delta l(\vartheta'_p)}{l_0}\right]^{3/2}}. \quad (90)$$

Ebben az integrálban  $\Delta l(\vartheta'_p)$  a minta  $\vartheta'_p$ -vel monoton növekvő nyúlását adja meg.

Polikristályos próbatestek tiszta csavarásakor is szükségképpen aktiválódnak olyan csúszások, amelyeknek van tengelymenti (nyúlást előidéző) komponense is. Tiszta csavarási feszültségek esetén ezen komponensek nagysága statisztikusan változik a minta tengelye mentén, ezért ilyenkor a minta alakja a csavarás hatására hullámossá válik. A  $\sigma_f$  nyújtási folyáshatárnál jelentősen kisebb ( $\sigma < 0,5\sigma_f$ ) tengelymenti feszültség hatására is azonban a minta nyúlása egyenletessé válik és a hosszváltozás jól mérhető lesz. Tulajdonképpen ez a jelenség teszi szükségessé, hogy ne tiszta csavarási deformációt, hanem egyidejű csavarást és nyújtást alkalmazzunk a csavarási deformáció vizsgálatára. A következőkben elemzett vizsgálatokban a *tengelymenti feszültség mindig kicsiny a csavarási feszültséghez képest* és a nyúlásból adódó ekvivalens nyírási deformáció is csak tört része a csavarásból származónak.



A minta maximális nyúlása mindig kisebb mint a kezdeti hossz tíz százaléka, ezért véges  $\Delta l$  nyúlásra a makroszkopikus deformáció a következő kifejezéssel adható meg:

$$\varepsilon = \ln \frac{l}{l_0} \cong \frac{\Delta l}{l_0}. \quad (91)$$

A (82) kifejezés integrálásával és a (89), (91) mennyiségek behelyettesítésével az átlagos ekvivalens csúszási deformációra a következő összefüggést kapjuk:

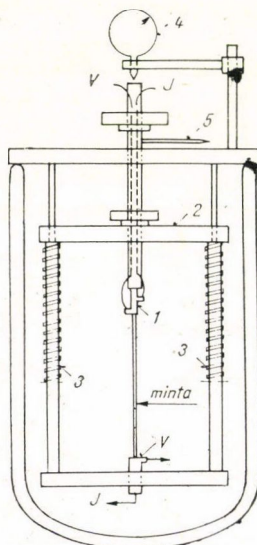
$$\bar{\gamma}_r = \sqrt{3} \bar{\gamma}_t + 3\varepsilon = \frac{2}{\sqrt{3}} \frac{a_0 \vartheta}{l_0} + 3 \frac{\Delta l}{l_0}. \quad (92)$$

Ez a kifejezés az első tagjában  $\sqrt{3}$  faktoriall különbözik az előzőekben publikálttól [89–92]. A kísérleti eredmények pontos elemzése a (92) összefüggést igazolja [93]. Az eltérés oka az, hogy az előző kifejezés meghatározásakor a (80) összefüggés nem lett figyelembe véve.

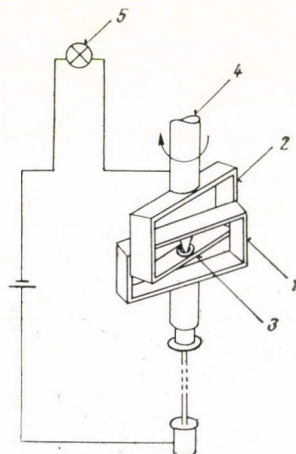
### 3. A KÍSÉRLETI BERENDEZÉS ÉS ELVI MŰKÖDÉSE

#### 3.1. A berendezés leírása

Az egyidejű csavarás és nyújtás során fellépő feszültség-deformáció összefüggés és elektromos ellenállásváltozás mérésére kidolgozott berendezés elvi felépítése a 17. ábrán látható. Mind a berendezés egy kezdeti formája, amely csak relatív feszültségek mérésére volt alkalmas, mind a berendezéssel kapcsolatos elvi kérdések egy



17. ábra. A csavaró berendezés sematikus rajza



18. ábra. A feszültség kompenzációhoz használt eszköz vázlata



része már előző dolgozatokban publikálásra került, ezért most csak azokat a kérdéseket foglaljuk össze, amelyek a továbbiakban lényeges szerepet kapnak, illetve az előzőkhöz képest újat jelentenek.

Az elektromos ellenállás változás vizsgálata alapvető információkat nyújt a deformáció mikromechanizmusára vonatkozóan, ezért ilyen méréseket a mechanikai mérésekkel párhuzamosan mindig végeztünk. Az 1. részfejekbe forrasztott mintához ezért a részfejekben keresztül áram és potenciálvezetékek is csatlakoztathatók. A csavaró tengely kézzel működtethető, az elcsavarodás szöge az 5. mutató segítségével olvasható le. A 3. rugók biztosítják az egyenletes nyúláshoz szükséges kicsiny tengelymenti feszültséget, a megnyúlás a forgástengelyhez csatlakoztatott indikátorórán olvasható le.

Lényeges módosítást jelent a minta csavarásához szükséges forgatónyomaték közvetlen mérését lehetővé tevő kiegészítő eszköz alkalmazása. A forgatónyomaték mérés a feszültség kompenzáció elve alapján történik. Adott mértékű képlékeny csavarás után a forgástengelyt visszacsavarodás nélkül kitámasztjuk, ezáltal az alakváltozáshoz szükséges nyomaték a kitámasztási pontot terheli. A forgástengelyhez egy kalibrált spirálrugón keresztül egy tárcsa csatlakozik, amellyel ismert nyomaték gyakorolható a tengelyre. Amikor a tengelyre rávitt nyomaték a kitámasztási pont terhelését éppen megszünteti, akkor leolvasható az előző alakításhoz alkalmazott nyomaték értéke. A kompenzált állapot pontos észlelése a 18. ábrán mutatott egyszerű eszköz segítségével lehetséges. A csavaró tengelyen elhelyezett és egymáshoz tűtengelyen keresztül csatlakozó két fémkeret a tengely két oldalát fémesen összekapcsolja mindaddig, amíg az alakítási feszültséget alul kompenzáljuk. Egy kicsiny túlkompenzáció azonban már megszakítja a fémes kapcsolatot (a tűtengely bakelit perselyben való elhelyezése miatt), ami az 5. elektromos izzóval észlelhető. Ugyanez az egyszerű eszköz lehetővé teszi a rugalmas visszacsavarodási szög pontos mérését is, amely a relatív feszültségmérés alapjául szolgál [92].

Az elektromos ellenállás mérések a szokásos két kompenzátoros módszerrel történtek, kb.  $10^{-10} \Omega \text{cm}$  pontossággal. Ezek részletei az előző dolgozatokban adottak [92].

### 3.2. Folyási feszültség-deformáció összefüggés meghatározása csavarási deformáció esetén

Az e pontban tárgyalandó kérdések lényegi részét előző dolgozataimban [92] már szintén tárgyaltam, azonban célszerű most is röviden áttekinteni őket a közvetlen forgatónyomaték mérésekkel kapcsolatban.

A csavarási deformáció során mérhető feszültség-deformáció összefüggés meghatározását az teszi nehezzé, hogy a minta különböző sugarú helyein a feszültségek és a deformációk is különbözők. A makroszkopikusan mérhető mennyiség egyrészt az a forgatónyomaték, amely szükséges adott  $\vartheta_p$  plasztikus elcsavarodási szög létrehozásához, másrészt a  $\vartheta_p$  paraméter, amely nyilvánvalóan a legkülső sugárhoz tartozó elcsavarodási szöget adja meg. Mind a két paraméter bonyolult kapcsolatban van a minta egyes helyein levő feszültséggel és deformációval. Világos ugyanis, hogy a plasztikus folyáshoz szükséges feszültségek a minta sugara mentén általában nem lineárisan változnak.

Legyen  $\tau(r, \vartheta_a)$  az  $r$  sugarú helyen működő feszültség a pillanatnyi csavarási



folyáshatárhoz tartozó forgatónyomatékkal terhelt testben. Ez a forgatónyomaték a következő kifejezéssel adható meg

$$M(a, \vartheta_a) = 2\pi \int_0^a \tau(r, \vartheta_a) r^2 dr, \quad (93)$$

ahol  $\vartheta_a$  a már előzőleg alkalmazott plasztikus csavarás szöge hosszegységenként. Ezen szög és a forgatónyomaték mérésével kaphatjuk meg a forgatónyomaték-csavarási szög összefüggést, amely az alapját képezi valamennyi csavarási vizsgálatnak. A képlékeny alakváltozás mechanizmusára azonban a feszültség-deformáció összefüggés a jellemző.

A forgatónyomaték-elcsavarodási szög kapcsolatból a feszültség-deformáció összefüggés meghatározására *Nádai* dolgozott ki egy módszert [96]. Feltételezte, hogy a deformáció lineárisan változik a minta sugara mentén, továbbá, hogy a folyási feszültség egy adott sugárnál csak a helyi deformáció függvénye. Ennek alapján a minta külső sugarához tartozó feszültséget ki tudta fejezni a forgatónyomaték és deriváltja függvényeként. Sok vizsgálatot végeztek az irodalomban e módszer alapján [97, 98], azonban az alakítási keményedés mechanizmusára vonatkozóan ezek a vizsgálatok nem vezettek az egytengelyű nyújtással egyenértékű eredményekre. Valószínűleg ez az oka annak, hogy a csavarási deformáció — annak ellenére, hogy mint látni fogjuk, vitathatatlan előnyökkel rendelkezik —, csak az utóbbi években kezd elterjedni mint a képlékeny alakváltozás mechanizmusának vizsgálati módszere [99].

A *Nádai* által tett feltevések nem magától értetődőek és a következőképpen kerülhetők el. Tegyük fel, hogy a vizsgált mintát megterheljük adott forgatónyomatékkal, amely képlékeny alakváltozást indít meg. Az alakváltozás meghatározott deformáció után azonban szükségképpen megszűnik, amikor a keményedés révén megnövekedett folyási feszültségeket az alkalmazott forgatónyomaték már nem fedezi. Ekkor a külső forgatónyomatékkal az anyagban kialakult rugalmas feszültségek tartanak egyensúlyt, amelynek alapján a következő összefüggést írhatjuk fel:

$$M(a, \vartheta_a) = \mu \frac{a\varphi(\vartheta_a)}{2l} a^3 = 2\pi \int_0^a \tau(r, \vartheta_a) r^2 dr, \quad (94)$$

ahol  $\mu$  a nyírási modulusz és  $\varphi(\vartheta_a)$  az a *rugalmas* elcsavarodási szög, amelynél a rugalmas feszültségek kompenzálják az alkalmazott  $M(a, \vartheta_a)$  nyomatékokat.  $\varphi(\vartheta_a)$  jellemzi az alakítási keményedés következtében az anyag megnövekedett rugalmassági határát. Differenciáljuk a (94) egyenlet mindkét oldalát  $a$  szerint, akkor kapjuk, hogy

$$\tau(a, \vartheta_a) = \mu \frac{a\varphi(\vartheta_a)}{l} = \frac{2M}{\pi a^3}, \quad (95)$$

ahol az utolsó egyenlőségben kihasználtuk a rugalmas elcsavarodás szöge és a hozzátartozó forgatónyomaték közti összefüggést.

Eredményünk azt jelenti, hogy a minta külső sugarához tartozó pillanatnyi folyáshatár mindig megegyezik az adott forgatónyomaték hatására fellépő alakváltozási folyamat végén kialakuló, a külső sugárhoz tartozó rugalmas feszültséggel. Ez a feszültség pedig ugyanolyan kapcsolatban van a mintán fellépő forgatónyomatékkal, mintha a feszültség lineárisan változna a sugár mentén [92].



A (95) összefüggés alapján a pillanatnyi mért forgatónyomaték közvetlenül megadja a  $\gamma_a = a\vartheta_a$  deformációhoz tartozó nyírási folyás feszültséget:

$$\tau(\gamma_a) = \frac{2M(\gamma_a)}{\pi a^3}. \quad (96)$$

Ez az összefüggés természetesen csak a minta  $r=a$  sugarú helyén érvényes.

Ha a csavarás folyamán megnyúlás is fellép, akkor a  $\tau$  feszültség a  $\gamma$  ekvivalens csavarási deformáció függvénye lesz, amely (85) integrálásával most a következő:

$$\gamma = \gamma_a + \sqrt{3}\varepsilon. \quad (97)$$

A feszültség-deformáció görbe alakja meghatározható a forgatónyomaték mérése nélkül is a következő összefüggés alapján [92]:

$$\tau' = \frac{\tau}{\tau_A} = \frac{l_A^{3/2}}{\varphi_A} \cdot \frac{\varphi}{l^{3/2}}, \quad (98)$$

ahol az  $A$  index tetszőlegesen választott deformációhoz tartozó paramétereket jelöl. A  $\varphi$  szög az előzőkben ismertetett módszerrel jól mérhető [92].

## 4. KÍSÉRLETI EREDMÉNYEK

### 4.1. Elektromos ellenállás

A képlékeny alakváltozás során keletkező kristályhibák az elektromos ellenállást megnövelik. Az ellenállás változás első közelítésben a keletkező szórócentrumok számával arányos, ezért mérésével lehetőség nyílik a hibák mennyiségének vizsgálatára a deformáció módjának és nagyságának függvényében. Csavarással igen nagy (néhány száz százalék) deformációk is elérhetők, ezért az ellenállás változás széles deformáció tartományban vizsgálható. Ugyanakkor a szükségképpen fellépő megnyúlás relatív mértéke a kis, tengelymenti feszültség változtatásával jelentősen megnövelhető, azaz ugyanolyan csavarási deformációhoz különböző megnyúlások tartozhatnak. Ez lehetővé teszi a (92) összefüggés érvényességének vizsgálatát.

Jellegzetes görbesereget mutatnak ezüstre és rézre a 19., 20. ábrák a különböző tengelymenti feszültségek esetén kialakuló csavarási deformáció-megnyúlás összefüggésre vonatkozóan. A mérés cseppfolyós nitrogénben történt. A deformáció során mért ellenállás változást a 21., 22. ábrák mutatják, ahol az ellenállás változást a megnyúlás függvényében ábrázoltuk. Látható, hogy ugyanazon megnyúláshoz jelentősen különböző ellenállás változás tartozik, ha a csavarási deformáció különböző.

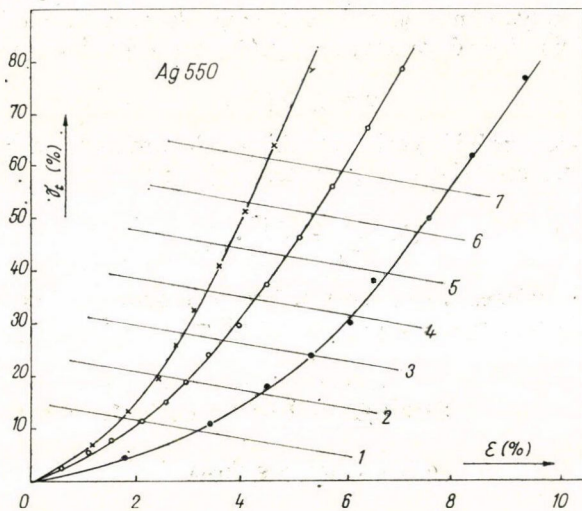
A (92) egyenlet érvényességének vizsgálatához a 19., 20. ábrákba párhuzamos egyenes sereget is berajzoltunk, amelyek iránytangense a következő:

$$\left( \frac{d\bar{\gamma}_t}{d\varepsilon} \right)_{\bar{\gamma}_r} = -\sqrt{3}. \quad (99)$$

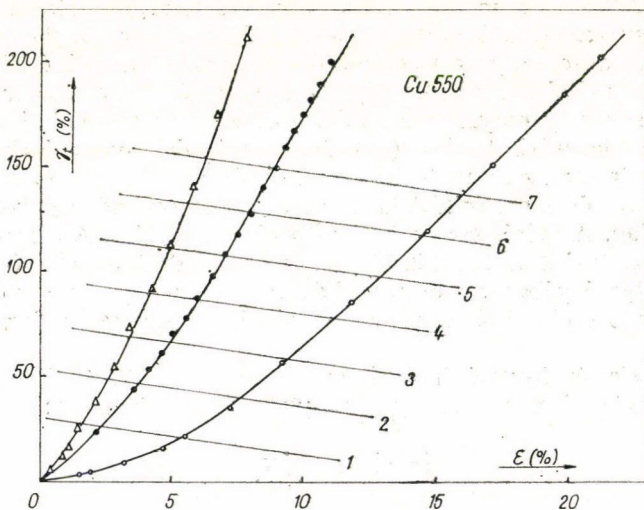
Ezek az egyenesek tehát a (92) egyenletet reprezentálják különböző  $\bar{\gamma}_r$  = állandó esetén. Ha az ellenállás változás csak az összes ekvivalens csúszási deformációtól



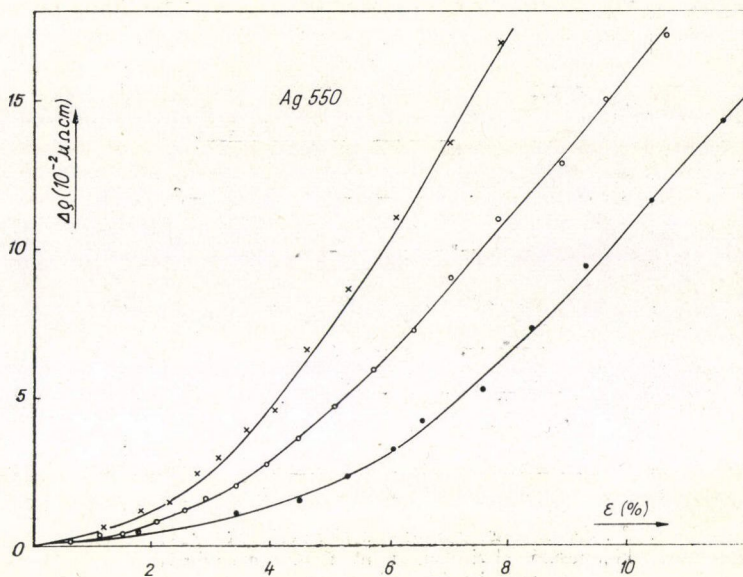
függ, akkor ezen egyenesek és az eredeti görbék metszéspontjaihoz tartozó ellenállás változásoknak ugyanazoknak kell lenniük, függetlenül a  $\bar{\gamma}_t/e$  hányados értékétől. A 23., 24. ábra mutatja a különböző egyenesek metszéspontjaihoz tartozó ellenállás változásokat. Látható, hogy az ellenállás változás valóban egyértékű függvénye a (92) alatti összes ekvivalens csúszási deformációnak. Hasonló eredmények adódnak más felületcentrált köbös fémre is.



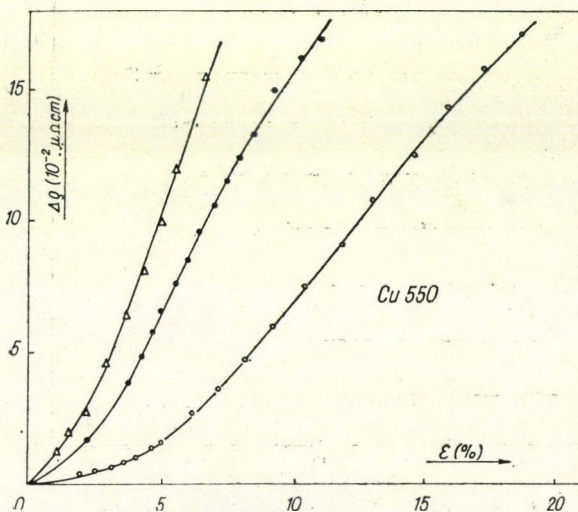
19. ábra. A csavarási és nyúlási deformáció összefüggése 550 °C-on hőkezelt Ag esetén



20. ábra. A csavarási és nyúlási deformáció összefüggése 550 °C-on hőkezelt Cu esetén

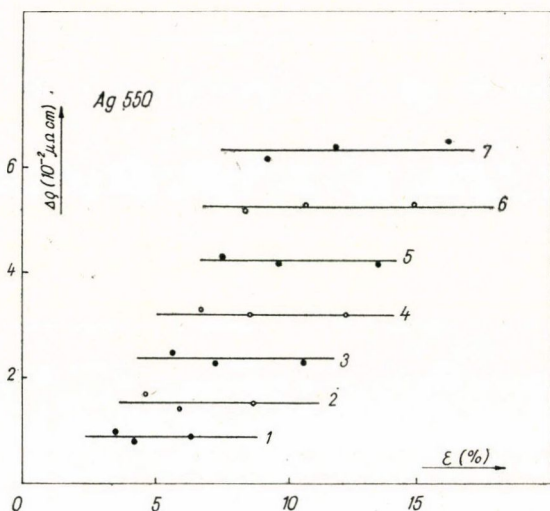


21. ábra. Ezüst elektromos ellenállás változása a nyúlási deformáció függvényében

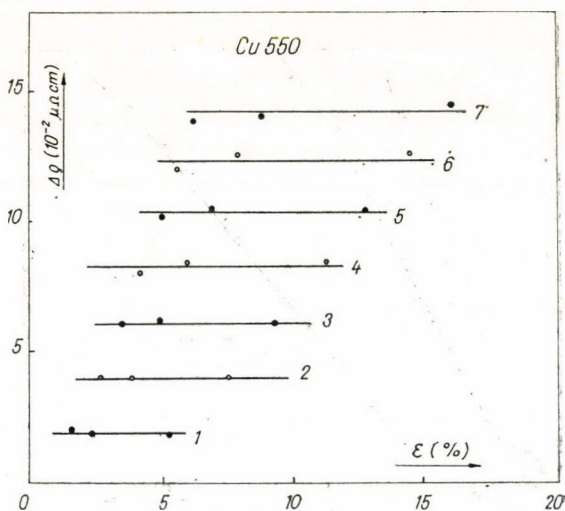


22. ábra. Réz elektromos ellenállás változása a nyúlási deformáció függvényében

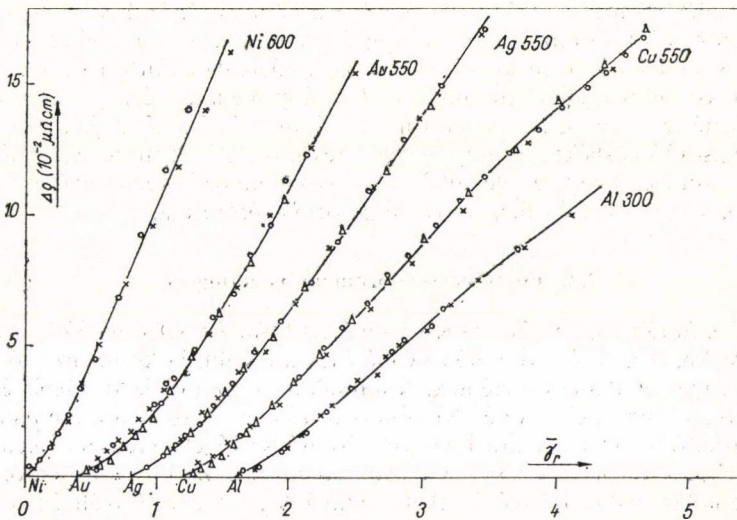




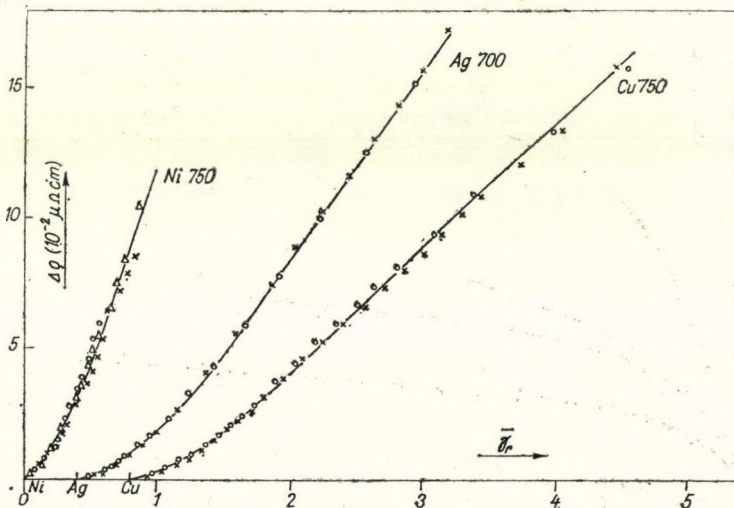
23. ábra. Ezüst elektromos ellenállás változása különböző ekvivalens nyírási deformációknál a nyúlási deformáció függvényében



24. ábra. Réz elektromos ellenállás változása különböző ekvivalens nyírási deformációknál a nyúlási deformáció függvényében



25. ábra. Elektromos ellenállás változás az ekvivalens nyírási deformáció függvényében különböző fémekre. A görbék mellé írt számok az előzetes hőkezelés hőmérsékletét jelentik



26. ábra. Elektromos ellenállás változás az ekvivalens nyírási deformáció függvényében más előhőkezelés után



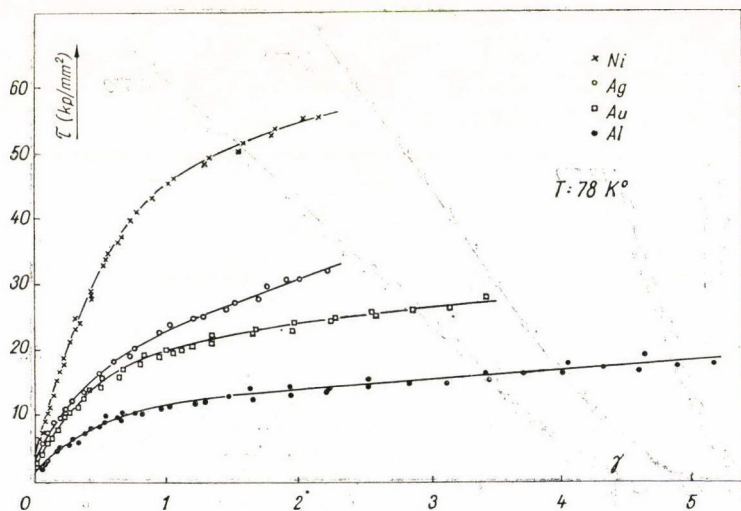
Az ellenállás változás egyértelmű függése az összes ekvivalens csúszási deformációtól akkor is jól kitűnik, ha ezt a függvénykapcsolatot ábrázoljuk. A 25. ábra öt különböző felületcentrált köbös fémen mért ellenállás változást mutat  $\bar{\gamma}$ , függvényében. A különböző jelek különböző  $\bar{\gamma}_t/\epsilon$  arány mellett mért görbéket jelölnek. A görbék mellé írt számok az előzetes hőkezelés hőmérsékletét adják meg  $^{\circ}\text{C}$ -ban. A 26. ábra hasonló görbéket mutat más előzetes hőkezelések után. A görbék egyértékűsége azt mutatja, hogy az ellenállás változás különböző szemcseméretű anyagok esetén is csak az összes ekvivalens csúszási deformációtól függ.

#### 4.2. Feszültség-deformáció összefüggés

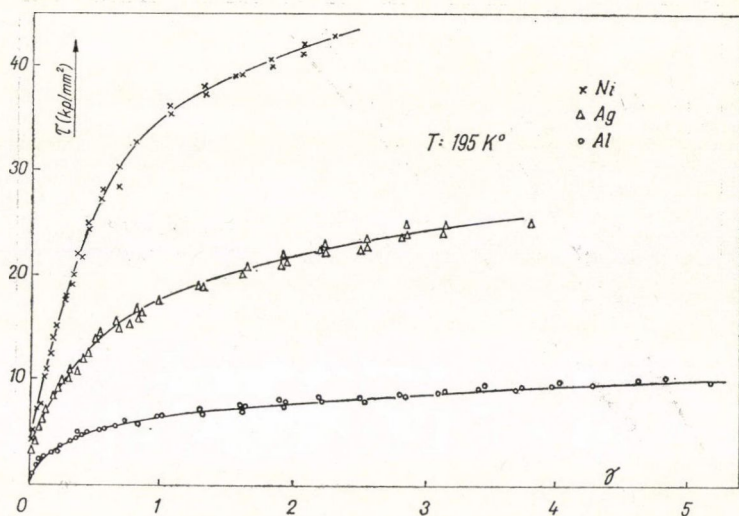
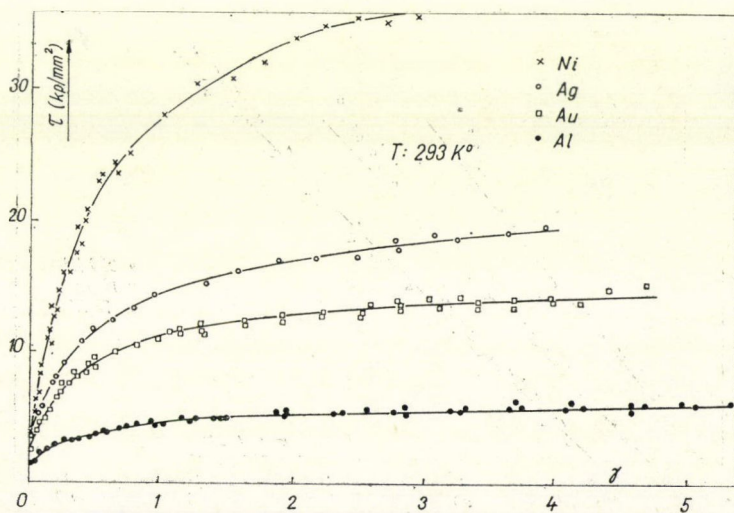
A 27—29. ábrák 78, 195 és 293  $\text{K}^{\circ}$ -on mért feszültség-deformáció összefüggéseket mutatják Au, Ag, Al és Ni esetén. A mérések a feszültség kompenzáció módszerével, a (96) egyenlet alapján történtek. A mintákat az ábrán jelzett hőmérsékleteken előzetesen hőkezeltük, a Cu, Ag és Ni mintákat minden esetben vákuumban. Az ábrákból jól látható, hogy a csavarási deformáció módszerével az alakítási keményedés folyamata még 78  $\text{K}^{\circ}$ -on is több száz százalék deformációig jól vizsgálható.

Az ellenállás változás mérésekkel egyidejűleg relatív feszültség méréseket is végeztünk. Az így kapott görbék hasonlóak a valódiakhoz. A  $\gamma_A$  deformációt ((98) egyenlet) 0,2-nek választottuk.

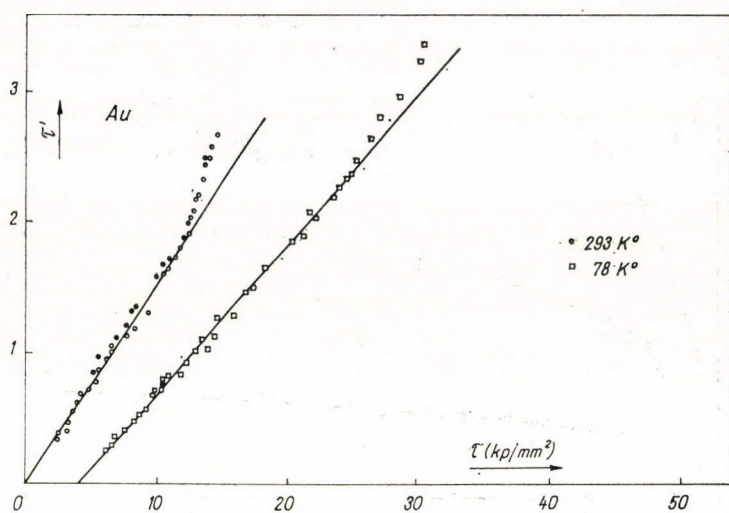
A relatív feszültség valódival való arányosságának az a feltétele, hogy a  $\mu$  nyírási modulusz ne változzon jelentősen a deformációval [92]. Ennek vizsgálatára ábrázoltuk  $\tau'$ -t a valódi feszültség függvényében. Az eredményt a 30—33. ábrák mutatják. Az egyeneseket az egyes görbék origójából  $1/\tau_{0,2}$  iránytangenssel rajzoltuk be a (98) egyenlet helyességének érzékeltetésére. Látható, hogy a  $\tau' - \gamma$  összefüggés pontosan



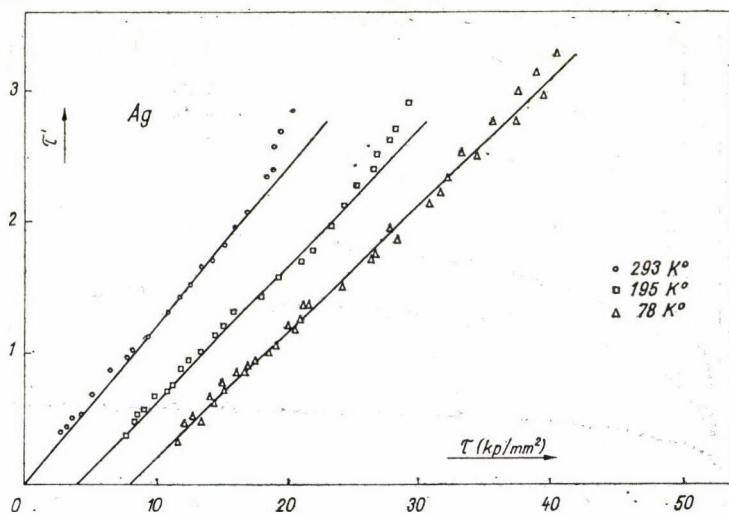
27. ábra. Csavarási feszültség-deformáció összefüggés  
78  $\text{K}^{\circ}$ -on különböző fémekre


 28. ábra. Ugyanaz, mint a 27. ábrán  $195 \text{ K}^\circ$  esetén

 29. ábra. Ugyanaz, mint a 27. ábrán  $293 \text{ K}^\circ$  esetén

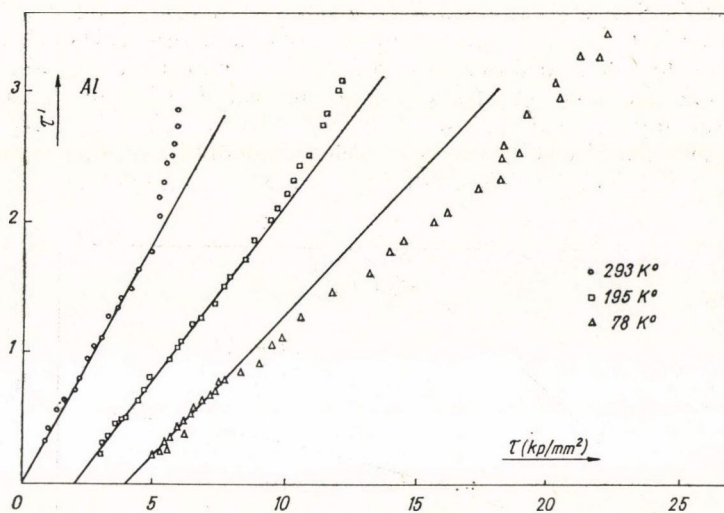




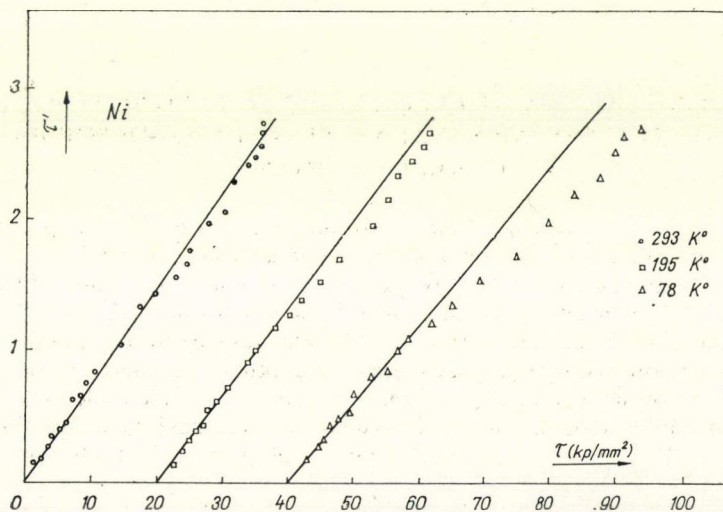
30. ábra. A valódi ( $\tau$ ) és a relatív ( $\tau'$ ) feszültség közötti kapcsolat Au esetén



31. ábra. Ugyanaz, mint a 30. ábrán Ag esetén



32. ábra. Ugyanaz, mint a 30. ábrán Al esetén

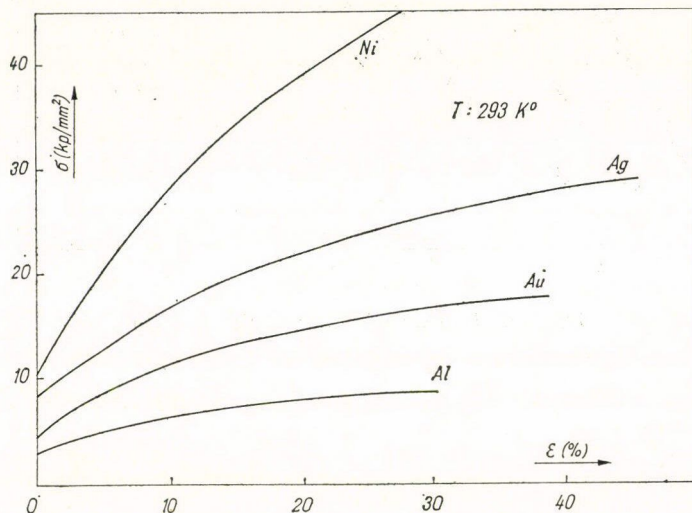


33. ábra. Ugyanaz, mint a 30. ábrán Ni esetén



viSSzaadja a valódi feszültség-deformáció görbe alakját viszonylag nagy deformáció-  
kig. Az érvényességi határ függ az anyagi minőségtől és a deformáció hőmérsékletétől.

A csavarási feszültség-deformáció görbékből levonható következtetések helyes-  
ségének ellenőrzésére egytengelyű nyújtás vizsgálatokat is végeztünk szobahőmér-  
sékleten Instron anyagvizsgáló berendezéssel. Az ezekben a vizsgálatokban használt  
nikkel tisztasága valamivel kisebb, mint az előzőé, a többi anyag azonban az elő-  
zőkkel azonos minőségű. A mérési eredményeket a 34. ábra mutatja.



34. ábra. Nyújtási feszültség-deformáció összefüggés  
szobahőmérsékleten különböző fémekre

## 5. AZ ALAKÍTÁSI KEMÉNYEDÉSRE LEVONHATÓ KÖVETKEZTETÉSEK A CSAVARÁSI FESZÜLTSG-DEFORMÁCIÓ GÖRBÉK ALAPJÁN

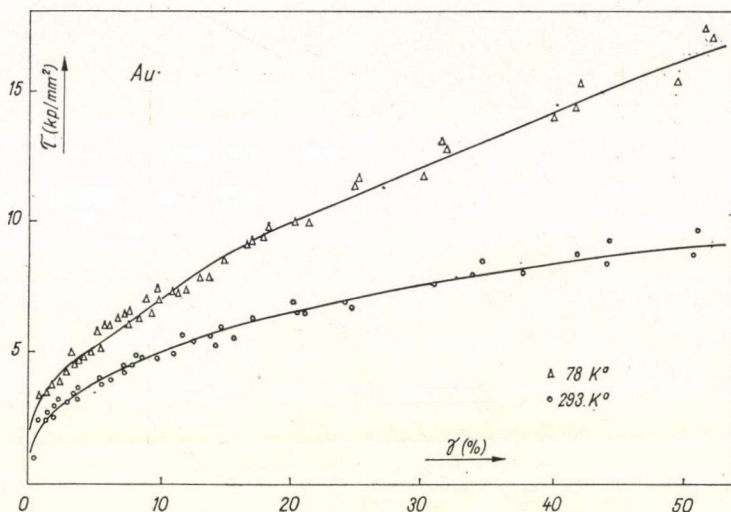
Ez a fejezet a csavarási feszültség-deformáció összefüggésből a polikristályos  
anyagok alakítási keményedési folyamatára levonható következtetéseket tárgyalja.  
Megmutatjuk, hogy ezen vizsgálatokból az egykristályokon mért adatokkal egyen-  
értékű eredmények nyerhetők, kivéve az igen kicsiny deformációkat.

Az alakítási keményedés I. szakasza, a könnyű, vagy egyszeres csúszás tartomá-  
nya (I/4.4. pont) polikristályos anyagokban nem alakulhat ki, mert egyetlen csúszási  
rendszer működése nem vezethet valamennyi szemcse egyidejű deformációjához.  
Ez utóbbi folyamat azonban már kialakulhat az alakítási keményedés további  
(II., lineáris és III., parabolikus) szakaszaiban, amikor már többszörös csúszás  
megy végbe.

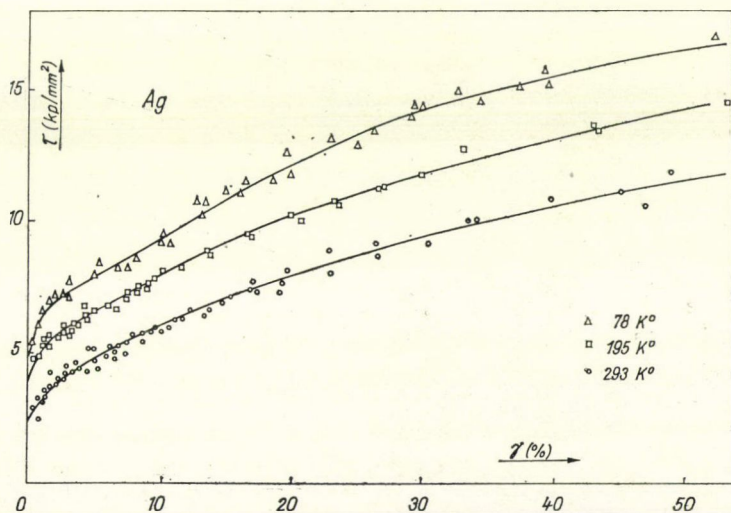
## 5.1. Az alakítási keményedés II. szakasza

A 35—38. ábrákon a csavarási feszültség-deformáció görbék kezdeti részét ábrázoltuk Au, Ag, Al és Ni esetén (a minták szemcsemérete kb. 50 mikron). A görbék kezdeti részén, egy átmeneti szakasz után, mindig található egy közelítőleg egyenes szakasz, amelynek egyenlete:

$$\tau = \chi_2 \gamma + \tau_{20}, \quad (100)$$

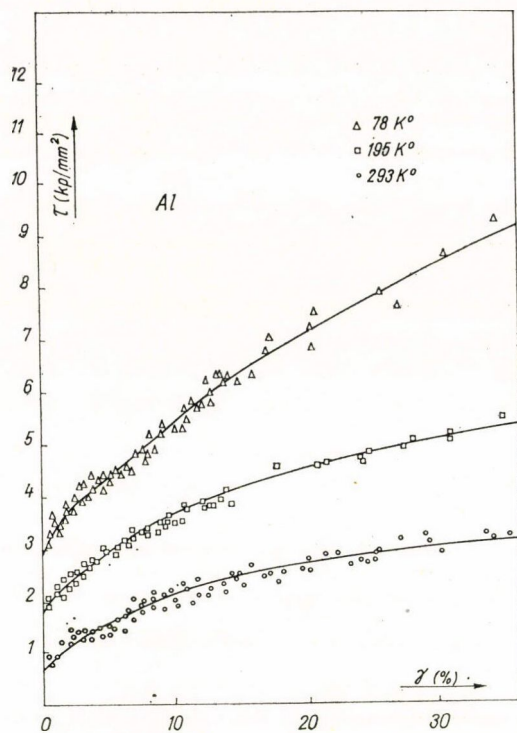


35. ábra. A csavarási feszültség-deformáció görbe kezdeti része Au esetén

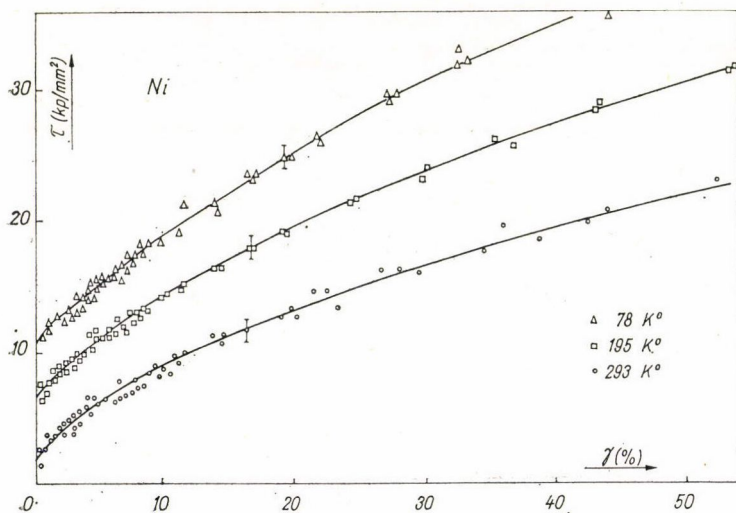


36. ábra. Ugyanaz, mint a 35. ábrán Ag esetén





37. ábra. Ugyanaz, mint a 35. ábrán Al esetén



38. ábra. Ugyanaz, mint a 35. ábrán Ni esetén

I. TÁBLÁZAT  
(Az összes adat kp/mm<sup>2</sup>-ben)

Anyag	$\chi_2$	$\Theta_2$	$\Theta_3$	$\sigma_3$	$3^{3/4}\chi_3(0)e^{-BT}$ szoba
Ag	29,5	90,0	37,1	12,8	33,5
Al	21,0	63,0	11,0	3,6	9,3
Au	36,0	110,0	26,2	6,0	25,2
Ni	75,2	220,0	78,0	17,4	72,4

ahol  $\chi_2$  az alakítási keményedés sebessége csavarási deformáció során, amely független a hőmérséklettől és  $\tau_{20}$  állandó. A görbékéből kapott numerikus adatokat az I. táblázatban foglaltuk össze.

Polikristályos minták esetén az alakítási keményedés II. szakasza általában csak közelítőleg lineáris. Ez a tény azonban nem korlátozza az összehasonlítást az egykristályok és a polikristályok között. A linearitástól való eltérés egy lehetséges oka a csúszások átterjedése az egyes szemcsékből a szomszédosokba [37].

A (79), (80) és (85) összefüggés felhasználásával meghatározhatjuk a kapcsolatot a csavarással deformált polikristály és az egytengelyű nyújtással alakított egykristály alakítási keményedésének sebessége,  $\Theta_{II}$  között a következőképpen:

$$\Theta_{II} = \frac{d\tau_r}{d\gamma_r} = \frac{d\left(\frac{\tau}{\sqrt{3}}\right)}{d(\sqrt{3}\gamma)} = \frac{\chi_2}{3}. \quad (101)$$

A mért  $\chi_2$  értékekből (101) alapján számított egykristály adatok jól egyeznek az egykristályokon mértekkel (I. táblázat). Hasonlóan jó egyezés adódik a  $\chi_2$  értékek és a polikristályokon egytengelyű nyújtással, a 34. ábra alapján kapott  $\Theta_2$  értékek között. A (74), (77) és (101) egyenletek felhasználásával a háromféle keményedési sebesség között a következő kapcsolat adódik:

$$\Theta_2 = \frac{d\sigma}{d\varepsilon} = 3\chi_2 = 9\Theta_{II}. \quad (102)$$

A numerikus adatokat az I. táblázat tartalmazza.

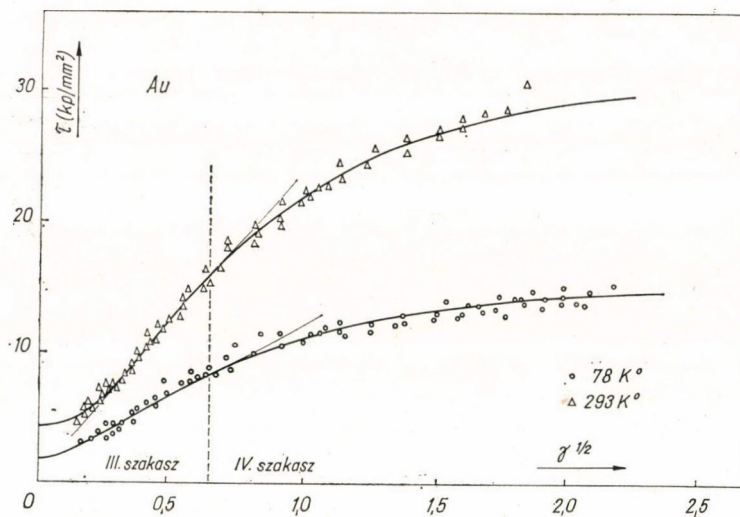
## 5.2. Az alakítási keményedés III. szakasza

Az alakítási keményedés III., parabolikus szakaszának analizéséhez a feszültség-adatokat ábráztuk  $\gamma^{1/2}$ , illetve  $\varepsilon^{1/2}$  függvényében. Az eredmények a 39–43. ábrákon láthatók. Valamennyi esetben a lineáris szakaszt (ebben az ábrázolásban a kezdeti konvex rész), jól definiált parabolikus (ebben az ábrázolásban egyenes) szakasz követ, amelynek egyenlete a csavarás esetén:

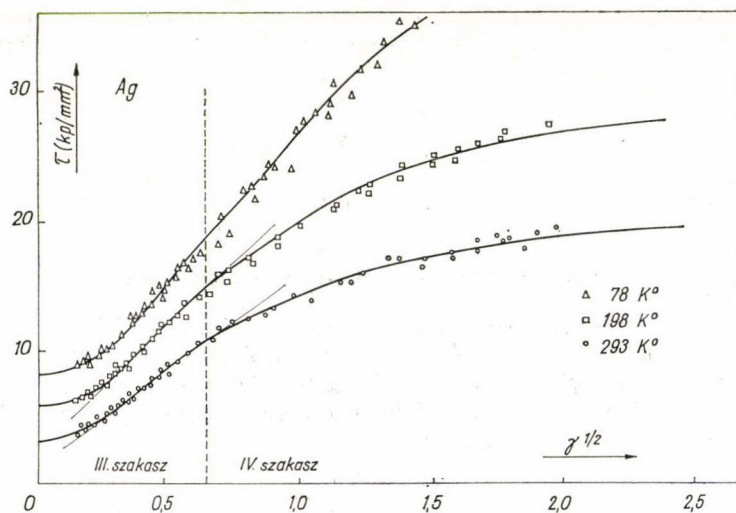
$$\tau = \chi_3\gamma^{1/2} + \tau_{30}, \quad (103)$$

ahol  $\tau_{30}$  állandó. A III. szakaszra jellemző  $\chi_3 = d\tau/d\gamma^{1/2}$  keményedési paraméter erősen hőmérsékletfüggő, ami a III. szakaszban kialakuló termikusan aktivált

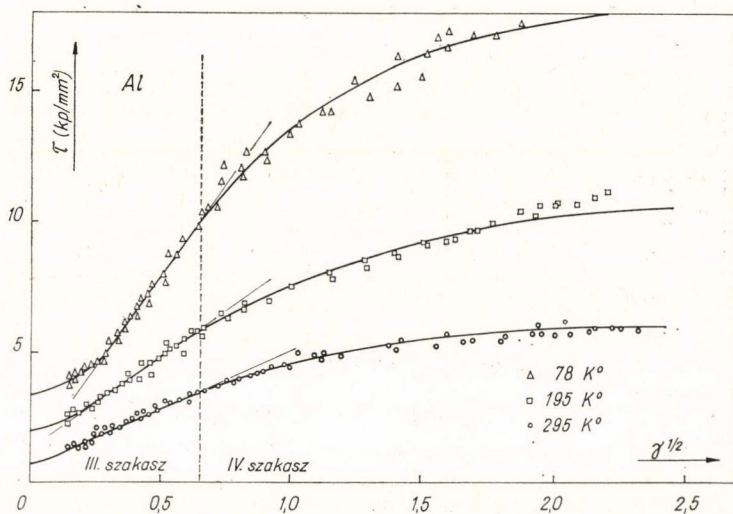




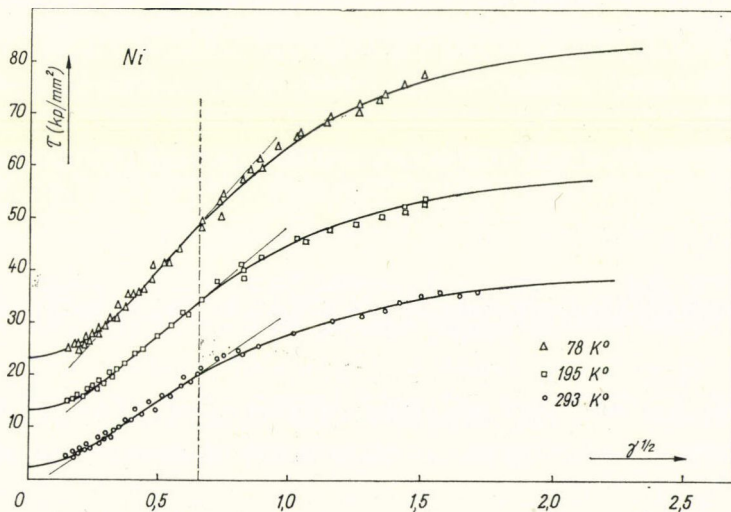
39. ábra. A csavarási feszültség a nyirási deformáció négyzetgyökének függvényében Au esetén



40. ábra. Ugyanaz, mint a 39. ábrán Ag esetén



41. ábra. Ugyanaz, mint a 39. ábrán Al esetén



42. ábra. Ugyanaz, mint a 39. ábrán Ni esetén



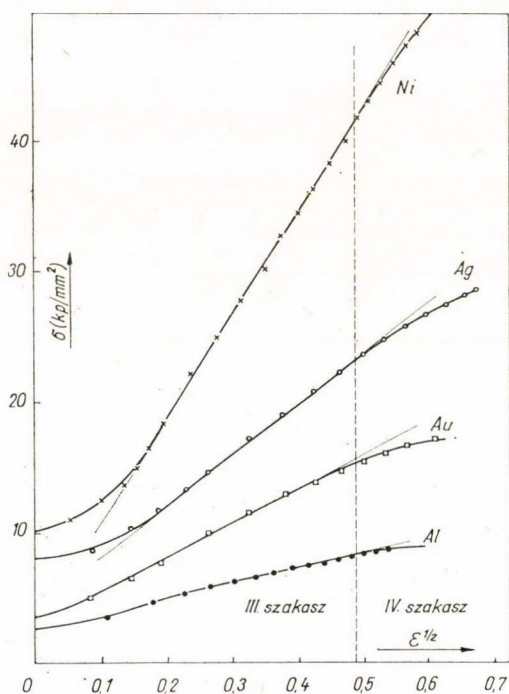
## II. TÁBLÁZAT

(Az összes adat kp/mm<sup>2</sup>-ben)

Anyag	$\chi_3$			$\tau_3$		
	78°K	195°K	293°K	78°K	195°K	293°K
Ag	24,2	19,4	15,0	8,4	6,8	4,8
Al	13,8	7,0	4,2	3,6	1,9	1,1
Au	22,8	—	10,8	6,2	—	2,8
Ni	55,0	41,0	32,0	13,1	8,2	5,8

keresztcsúszásoknak a következménye [100, 101].  $\chi_3$  és  $\tau_{30}$  numerikus értékeit a II. táblázatban adtuk meg.

Az ábrából jól látható, hogy a parabolikus feszültség-deformáció összefüggés csak kb.  $\gamma = 70\%$  deformációig érvényes. Nagyobb deformációknál egy új, IV. szakasz jelenik meg. Ebben a szakaszban az alakítási keményedés „sebessége”,  $d\tau/d\gamma^{1/2}$  monoton csökken növekvő deformációval.



43. ábra. Nyújtási feszültség a deformáció négyzetgyökének függvényében különböző fémekre

### 5.3. Összefüggés az alakítási keményedés II. és III. szakasza között

A „diszlokáció erdő” modell (I/4.5.2. pont) alapján megmutattam, hogy az alakítási keményedés II. és III. szakaszában a diszlokáció sűrűség növekedése a plasztikus munkával arányos [75]. Ennek alapján a II. és III. szakaszban egykristály esetén a (71) egyenletnek kell teljesülnie. Ez az egyenlet egykristály lineáris szakaszára a következő összefüggésre vezet [75]:

$$\tau_r = (2\alpha\mu b^2 \Theta_{II})^{1/2} \cdot N^{1/2},$$

amely az irodalomban gyakran felhasznált kapcsolat a folyási feszültség és a diszlokáció sűrűség között [47].

Alkalmazva a (71) egyenletet egykristály parabolikus szakaszára, az egykristály esetén érvényes

$$\tau_r = \Theta_{III} \gamma_r^{1/2} + \tau_{r3} \quad (104)$$

egyenlet felhasználásával a következő differenciális összefüggést kapjuk

$$\tau_r(\tau_r - \tau_{r3}) d\tau_r = \frac{1}{2} \alpha\mu b^2 \Theta_{III}^2 dN. \quad (105)$$

Nyilvánvalóan megengedhető feltevést jelent, hogy a feszültség „sima” függvénye a diszlokáció sűrűségnek a II. szakaszból a III.-ba való átmenet során: azaz nemcsak a feszültség, hanem a diszlokáció sűrűség szerinti deriváltja is folytonosan megy át a határon, tehát

$$\left( \frac{d\tau_r}{dN} \right)_{II, \tau_r = \tau_{III}} = \left( \frac{d\tau_r}{dN} \right)_{III, \tau_r = \tau_{rII}}; \quad \tau_r = \tau_{III}, \quad (106)$$

ahol  $\tau_{III}$  a III. szakasz kezdetéhez tartozó feszültség egykristályra. Ezek felhasználásával a II. és III. szakasz paramétereinek között a következő összefüggés adódik:

$$\tau_{III} = \frac{\Theta_{III}^2}{2\Theta_{II}} + \tau_{r3}. \quad (107)$$

Hasonló összefüggésre jutott *Bell* is más kiindulási feltételekből [102], azonban eredményéből a  $\tau_{r3}$  tag, a (104) egyenletben szereplő állandó hiányzik. Az eltérés abból származik, hogy a parabolikus szakasz leírására

$$\tau_r^2 = \Theta_{III}(\gamma_r - \gamma_{r0})$$

alakú egyenletet használt. A részletes analízis azonban azt mutatta, hogy a (104) alakú egyenlet sokkal jobban illeszthető a kísérleti adatokhoz.

### 5.4. A III. szakasz paramétereinek hőmérsékletfüggése

A (107) egyenlet lehetőséget nyújt arra, hogy a  $\tau_3$  paraméter (a III. szakasz kezdetéhez tartozó feszültség csavaráskor) értékét pontosan megkapjuk, mert a másik három paraméter sokkal pontosabban meghatározható, amint ez jól kitűnik az ábrákból. A kapott adatokat a II. táblázat tartalmazza; ezek jól egyeznek az egykristályokon mértékekkel [48].



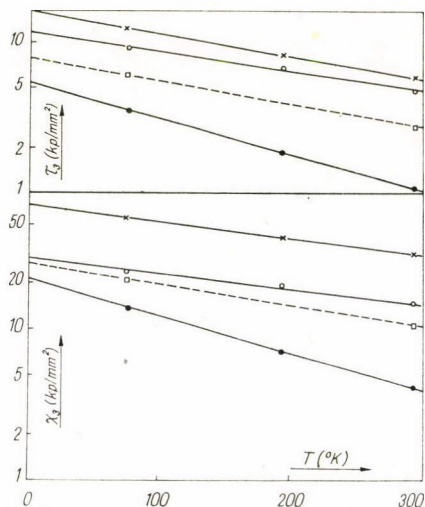
Láttuk, hogy korábbi vizsgálatok szerint (I/4.3.1. pont)  $\tau_{III}$  (vagy  $\tau_3$ ) a hőmérséklet exponenciális függvénye. Jelen kísérleti adataink is igazolják ezt a hőmérsékletfüggést nemcsak  $\tau_3$ -ra, hanem  $\chi_3$ -ra is, amint ez kitűnik a 44. ábrából. Így  $\chi_3$  is a következő alakban adható meg:

$$\chi_3 = \chi_3(0) \cdot e^{-B \cdot T}. \quad (108)$$

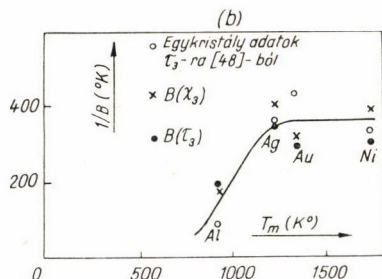
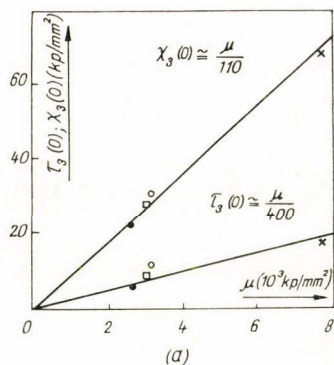
Várható, hogy  $\tau_3$  és  $\chi_3$   $T=0$ -ra extrapolált értékei összefüggésbe hozhatók a nyírási modulusszal. Mivel a nyírási modulusz csak kevésbé függ a hőmérséklettől, ezért  $\tau_3(0)$ -t és  $\chi_3(0)$ -t a szobahőmérsékleti nyírási modulusz függvényében ábrázoltuk. Az eredményt a 45a ábra mutatja. Látható, hogy az összefüggés mindkét esetben jó közelítéssel origóból induló egyenes, a következő iránytangensekkel

$$\frac{\chi_3(0)}{\mu} \cong \frac{1}{110}; \quad \frac{\tau_3(0)}{\mu} \cong \frac{1}{400}. \quad (109)$$

Megkíséreltünk kapcsolatot keresni a kitevőkben szereplő  $B$  mennyiség és a fém  $K^\circ$ -ban mért olvadáspontja között. Az eredmény a 45b ábrán látható és azt mutatja,



44. ábra. A  $\chi_3$  és  $\tau_3$  paraméterek hőmérséklet függése;  $\square$  Au,  $\circ$  Ag,  $\times$  Ni



45. ábra. a)  $\chi_3(0)$  és  $\tau_3(0)$  függése a szobahőmérsékleti nyírási modulusztól;  $\square$  Au,  $\circ$  Ag,  $\times$  Al,  $\times$  Ni b) A  $B$  paraméter függése az olvadásponti hőmérséklettől

hogy nincs egyszerű összefüggés  $1/B$  és  $T_m$  között. Összehasonlításként feltüntetjük a Berner és Kronmüller által meghatározott,  $\tau_{III}$ -ra vonatkozó  $B$  adatokat is [48], ezek jó egyezésben vannak a polikristályos próbatesteken mért értékekkel.

A csavarási és nyújtási mérési eredmények összehasonlítására határozzuk meg a III. szakasz  $\chi_3$ , illetve  $\Theta_3$  paramétereit közti összefüggést. A (74), (77), (79) és (80) egyenletek felhasználásával:

$$\Theta_3 = \frac{d\sigma}{d\varepsilon^{1/2}} = \frac{d(\sqrt{3}\tau)}{d\left(\frac{\gamma}{\sqrt{3}}\right)^{1/2}} = 3^{3/4} \cdot \chi_3. \quad (110)$$

A (108) és (110) összefüggések segítségével, a csavarással mért adatokból kiszámíthatjuk a szobahőmérsékletre vonatkozó  $\Theta_3$  paraméter értékét, s ezt összehasonlíthatjuk a közvetlenül mérttel. Az eredményeket az I. táblázat tartalmazza. Ezekből kitűnik, hogy a számított értékek általában 10 %-on belül megegyeznek a mértékekkel. Ez igen jó egyezésnek tekinthető, ha figyelembe vesszük a feszültség-deformáció mérések pontosságát és azt, hogy a nyújtás mérések a csavaráshoz képest viszonylag nagy ( $10^{-3}/s$ ) sebességgel készültek.

### 5.5. Az alakítási keményedés IV. szakasza

A 39—43. ábrákból világosan kitűnik, hogy — legalábbis polikristályos fémekben — a III. szakasz kiterjedése erősen korlátozott; nagy deformációknál egy új szakasz jelenik meg az alakítási keményedésben. Ezen új szakasz létezésének határozott megállapítása felületcentrálalt köbös fémekre jelen dolgozat szerzőjétől származik [75, 92]. Voltak olyan előzetes jelzések, hogy a feszültség-deformáció görbe nem írható le  $\gamma_r^{1/2}$  függvényeként tetszőleges deformációig  $\tau_{III}$  fölött [103], azonban egy új szakasz létezését nem állapították meg. Ugyanakkor ismeretes volt, hogy magas hőmérsékleti deformáció esetén — amikor tiszta nyújtással is lényegesen nagyobb deformációk érhetők el mint alacsony hőmérsékleten —, az alakítási keményedés során a folyási feszültség telítési értékhez tart [103]. Erre a magas hőmérsékleti képlékeny alakításra az jellemző, hogy stacionárius diszlokáció szerkezet alakul ki, közelítőleg azonos átmérőjű szubszemcsék képződésével. Ennek az alakváltozási folyamatnak a természete ma már elég jól ismert [99].

Az alacsony hőmérsékleti alakváltozás során a IV. szakasz kialakulása valószínűleg azért került el a figyelmet, mert a feszültség-deformáció összefüggés vizsgálatokat — mind egykristály, mind polikristály esetén — csaknem kizárólag nyújtással végezték, amikor a törés nem sokkal a III. szakasz befejeződése után bekövetkezik. Így az esetleges eltéréseket (43. ábra) a törés előtti bizonytalanságoknak lehetett tekinteni. A IV. szakaszt biztonsággal ezért csak csavarással, vagy egytengelyű kompresszióval lehet vizsgálni [75, 99]. A csavarási deformációt valószínűleg azért nem alkalmazták az előzőekben kiterjedten, mert a mintában a deformáció eloszlása nem homogén. A jelen módszer azonban ezt a nehézséget megszünteti, mert mint a II/3.2. pontban kimutattuk, a mért feszültség-deformáció összefüggés a minta jól definiáltan alakított részére vonatkozik.

A 39—43. ábrák alapján látható, hogy a IV. szakaszban az alakítási keményedés sebessége gyorsan csökken és a folyási feszültség egy deformáció független állandó



$\tau_s$  értékéhez tart, azaz a folyamat olyanná válik, mintha egyre inkább kúszás jellegű — keményedés nélküli — alakváltozás menne végbe. Ezt a jelenséget más csavarási és kompressziós vizsgálatokban is észlelték [97—99]. Az állandó  $\tau_s$  feszültség telítési értéknek tekinthető, azaz a folyási feszültség ezt csak aszimptotikusan közelíti meg. Ennek figyelembevételével a jelen kísérleti adatok elemzése azt mutatta, hogy a feszültség-deformáció összefüggés a IV. szakaszban az alábbi alakú empirikus egyenlettel írható le:

$$\tau = \tau_s - A e^{-\left(\frac{\gamma}{\gamma_4}\right)^{1/2}}, \quad (111)$$

ahol  $A$  állandó és  $\gamma_4$  az a deformáció, amelynél a IV. szakasz kezdődik.

### 5.6. Összefüggés a III. és IV. szakasz paraméterei között

A III. és IV. szakasz paraméterei közötti kapcsolat meghatározásához a 39—43. ábrák alapján ésszerű feltevésnek vehetjük, hogy a feszültség és deriváltja a deformáció függvényében folytonosan megy át a III. szakaszból a IV-be, azaz

$$\tau(\gamma_4)|_{III} = \tau(\gamma_4)|_{IV}, \quad (112)$$

és

$$\left(\frac{d\tau}{d\gamma}\right)_{\gamma_4}|_{III} = \left(\frac{d\tau}{d\gamma}\right)_{\gamma_4}|_{IV}. \quad (113)$$

Felhasználva a (103) és (111) egyenleteket, a IV. szakasz leírására a következő függvénykapcsolatot kapjuk:

$$\tau = \tau_4 + \chi_3 \gamma_4^{1/2} \left[ 1 - e^{-\left\{\left(\frac{\gamma}{\gamma_4}\right)^{1/2} - 1\right\}} \right]; \quad \tau \geq \tau_4, \quad (114)$$

ahol  $\tau_4 = \chi_3 \gamma_4^{1/2} + \tau_{30}$ .

A (114) egyenlet numerikus vizsgálata azt mutatja, hogy a 39—42. ábrák valamennyi görbéjéhez akkor kaphatunk igen jó illesztést, ha felhasználjuk a táblázatok III. szakaszra vonatkozó adatait és valamennyi anyag és hőmérséklet esetén a IV. szakasz kezdetét egységesen  $\gamma_4 = 0,42$ -nek vesszük. Ez az eredmény azt jelenti, hogy felületcentrált köbös, polikristályos fémekben a IV. szakasz jól definiált deformáció után alakul ki.

A görbék illesztésének jóságát jól érzékelhetjük a 39—42. ábrákon, ahol a IV. szakasz folytonos görbáját a (114) egyenletből számítottuk. Numerikus adatokat a 3. táblázatban adtunk meg.

### III. TÁBLÁZAT

(Az összes adat  $\text{kp/mm}^2$ -ben)

Anyag	$\tau_4$			$\tau_s$		
	78°K	195°K	293°K	78°K	195°K	293°K
Ag	?	13,0	10,6	?	25,6	20,2
Al	8,0	4,9	3,4	17,0	9,5	6,0
Au	13,8	—	8,2	28,6	—	15,2
Ni	28,8	23,7	19,8	64,6	50,4	40,0

Eredményünk helyességét alátámasztják a tiszta nyújtással végzett mérések is. A (77) és (80) egyenlet felhasználásával a IV. szakasz kezdetére nyújtás esetén  $\gamma_4$ -ből  $\varepsilon_4 = \gamma_4/\sqrt{3} = 0,24$ , illetve  $\varepsilon_4^{1/2} = 0,49$  adódik. A 43. ábrán látható, hogy a III. szakasztól való eltérés éppen ilyen deformáció környezetében kezdődik meg.

### 5.7. Elektromos ellenállás változás az alakítási keményedés III. szakaszában

A fémek alacsony hőmérsékleti képlékeny alakításakor az elektromos ellenállás-változás két lényeges részből tevődik össze, a ponthibáktól és diszlokációktól származó változásból. *Saada* kimutatta, hogy a keletkező ponthibák száma arányos a plasztikus munkával [104]. *Peiffer* kísérletileg [105], *Feltham* pedig egy elméleti modell alapján megmutatta [106], hogy a keletkező ponthibák és diszlokációk száma arányos egymással. A diszlokáció erdő modell alapján jelen szerző ugyanezre az eredményre jutott [75].

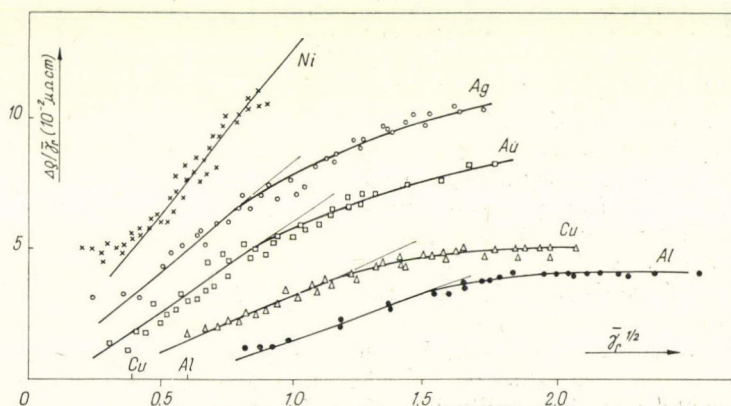
A (71) egyenlet a diszlokáció sűrűség növekmény plasztikus munkával való arányosságát fejezi ki. Ez — mint említettük — triviális eredményt jelent a lineáris szakaszra, mert ekkor  $d\gamma_r \sim d\tau_r$  és integrálással a jól ismert (72) összefüggésre jutunk. Az ellenállás mérések segítségével igazoljuk azonban, hogy a (71) egyenlet a III. szakaszra is érvényes.

Ha a (71) egyenlet érvényes a III. szakaszra is, akkor a diszlokáció sűrűség és ponthiba koncentráció arányossága miatt a teljes ellenállás változás az összes ekvivalens csúszási deformációtól a következőképpen függ:

$$\Delta \varrho = \Delta \varrho_{III} \left( \frac{2}{3}, \bar{\gamma}_r^{3/2} + \gamma_{r3} \cdot \bar{\gamma}_r \right), \quad (115)$$

ahol  $\gamma_{r3} = \tau_{r3}/\Theta_{III}$  és  $\Delta \varrho_{III}$  egy mért paraméter.

Ez utóbbi egyenlet érvényességének igazolására a II/4.1. pontban ismertetett mérési eredmények felhasználásával ábrázoltuk  $\Delta \varrho/\bar{\gamma}_r$ -t  $\bar{\gamma}_r^{1/2}$  függvényében. Az eredményt a 46. ábra mutatja. Bár a mérési pontok szórása megnövekedett a  $\bar{\gamma}_r$ -rel való osztás miatt, az világosan kitűnik az ábrából, hogy valamennyi görbének van egy



46. ábra. Összefüggés a  $\Delta \varrho/\gamma_r$  és  $\gamma_r^{1/2}$  mennyiségek között



egyenes szakasza, amely kb.  $\bar{\gamma}_r^{1/2} = 0,8$ -nél ér véget (a rézre és alumíniumra vonatkozó görbe origója a jelzett pontba van eltolva). A (80) egyenlet alkalmazásával a III. szakasz végét kiszámíthatjuk az ekvivalens csúszási deformációval is a következőképpen:  $\bar{\gamma}_{r4}^{1/2} = 3^{1/4} \gamma_4^{1/2} = 0,86$ , s ez igen jól egyezik az egyenesektől való eltérés kezdetével.

Eredményünk lehetővé teszi a diszlokációk okozta ellenállás változás becslését. A (71), (104) és (115) összefüggések alapján a diszlokációk ellenállására a következő kifejezést kapjuk:

$$\varrho_d = \left( \frac{d\Delta\varrho}{dN} \right)_{\text{III}} = \alpha_0 \mu b^2 \beta \frac{\Delta\varrho_{\text{III}}}{\Theta_{\text{III}}}, \quad (116)$$

ahol  $\beta$  a diszlokációktól és ponthibáktól származó ellenállás változás arányát jelenti,  $\Delta\varrho_{\text{III}}$  pedig a 46. ábra egyenes szakaszainak iránytangenséből határozható meg. Így minden parameter ismert,  $\beta$ -t kivéve. Itt az irodalomban szokásos feltevést tesszük, mely szerint a diszlokációk és ponthibák által okozott ellenállás változás első közelítésben egyenlőnek vehető, azaz  $\beta \cong 1/2$ . Az így számított diszlokáció ellenállás adatokat a IV. táblázat tartalmazza, azokkal a paraméterekkel együtt, amelyeket a számításban felhasználtunk (a rézre vonatkozó  $\chi_3$  értéket  $\tau' - \gamma$  görbe nyújtással kapottal való összehasonlításából határoztuk meg;  $\tau_{0,2} = 20,2$  kp/mm<sup>2</sup> érték felhasználásával). A kapott diszlokáció ellenállás adatok jó egyezésben vannak más kísérleti és elméleti adatokkal [107—110].

IV. TÁBLÁZAT

Anyag	$\Delta\varrho_{\text{III}}$ ( $10^{-8} \Omega \text{ cm}$ )	$\mu$ ( $10^3 \text{ kp/mm}^2$ )	$b$ ( $10^{-8} \text{ cm}$ )	$\varrho_d$ ( $10^{-19} \Omega \text{ cm}^3$ )
Ag	12,6	3,1	2,88	3,1
Al	5,6	2,6	2,86	2,0
Au	10,5	3,0	2,87	2,6
Cu	6,5	4,0	2,55	1,9
Ni	18,9	7,7	3,51	7,4

## 6. DISZKUSSZIÓ

Az irodalomban csak néhány jelzés ismeretes arra, hogy a felületcentrált köbös fémek alakítási keményedésében a parabolikus szakasztól nagy deformációknál eltérés van [103]. Jelen dolgozatban kimutattuk, hogy ha olyan deformálási módszert alkalmazunk, amely a tiszta nyújtásnál lényegesen nagyobb deformációk elérését teszi lehetővé, akkor biztonsággal megállapítható, hogy az alakítási keményedés III. szakasza polikristályos felületcentrált köbös fémek esetén anyagi minőségtől független, jól definiált deformációnál befejeződik. Ezután egy új, IV. szakasz alakul ki, amelyben a keményedés sebessége gyorsan csökken és a folyási feszültség telítési értékhez tart.

Egyszerű elvi megfontolás is egyértelműen azt mutatja, hogy az alakítási keményedés folyamata nem fejeződhet be a parabolikus szakasszal. Világos ugyanis, hogy a (104) egyenlettel adott parabolikus keményedés nem ad felső határt az alakítási keményedéssel elérhető folyási feszültségre. Jól ismeretes azonban, hogy a kristályos



testek folyási feszültsége nem lehet nagyobb az ideális vagy elméleti kritikus nyírási feszültségnél [111]:

$$\tau_r < \tau_{id} \cong \frac{\mu}{30}.$$

Ezzel az egyszerű fizikai követelménnyel csak úgy tudunk egyezésben maradni, ha feltesszük, hogy az alakítási keményedés utolsó, törés előtti szakasza olyan összefüggéssel írható le, amely növekvő deformációval a folyási feszültségre a kritikus nyírási feszültségnél nem nagyobb telítési értéket ad.

### 6.1. A III. szakasz dinamikus megújulási jellege

Az alakítási keményedés sebessége a második szakaszban,  $\Theta_{II}$  gyengén függ ugyan a hőmérséklettől [70], amelyet *Feltham* a kristály plaszticitás stochasztikus modellje alapján interpretálni tudott [112, 113], mégis a keményedés természete ebben a szakaszban jó közelítéssel termikus aktiválásoktól mentesnek tekinthető [47]. Ennek alapján a folyási feszültség változását ebben a szakaszban a következő mechanizmussal lehet kvalitatíve értelmezni. A deformáció növekedése során keletkező diszlokációk egy része olyan akadályokat képez a további diszlokáció mozgással szemben, amelyek termikus aktiválással nem győzhetők le. Ezen folyamat során egy jól definiált mikroszerkezet alakul ki, a plasztikus munkával arányos diszlokáció sűrűséggel. Mivel ebben a folyamatban a termikus aktiválásnak első közelítésben elhanyagolható hatása van, ezért ez a folyamat meghatározó szerepet játszik  $0\text{ K}^\circ$  környezetében végzett alakítások során, viszonylag nagy deformációkig. Ez az oka annak, hogy az ilyen hőmérsékleteken egykristályokon végzett mérésekben az alakítási keményedés csaknem teljesen a lineáris szakaszban megy végbe [52].

Az új diszlokációk folytonos keletkezéséhez a diszlokáció források működése szükséges a primer csúszási rendszerekben. Az új diszlokációk keletkezéséhez azonban nemcsak a források aktiválása szükséges, hanem az új diszlokációkat be kell préselni az adott mikroszerkezetbe. Minden ilyen elemi lépés egy kicsiny változást idéz elő a mikroszerkezeten, más szóval a diszlokáció forrás a mikroszerkezet folytonosan változó „keménysége” ellenére kell működjön. A II. szakaszban ehhez a keménység változáshoz gyakorlatilag az összes új diszlokáció hozzájárul.

Jelentősen változik a helyzet, ha a deformációt  $T > 0\text{ K}^\circ$  hőmérsékleten végezzük. Egy bizonyos, a hőmérséklettől függő deformációig most is az előbbi folyamat zajlik le. Ez utóbbi deformációnál a folyási feszültség eléri a  $\tau_{III}$  értéket. További deformáció során beindul a III. szakasz, amikor a primer csúszási rendszerek aktiválása mellett keresztcsúszások is kialakulnak [100, 101]. Az előzetesen létrejött mikroszerkezetbe tömörült diszlokációk egy része a keresztcsúszások révén kiszabadulhat belőle, csökkentve ezáltal a mikroszerkezet keménységének növekedési ütemét. Feltehetjük, hogy nem túl magas hőmérsékleteken, pl.  $78\text{ K}^\circ$ -on a keményedés folyamata a III. szakaszban is elsődlegesen ugyanazon mikroszerkezet változása révén megy végbe, csak a változás sebessége csökken le növekvő deformációval a keresztcsúszások lehetősége miatt. Ezzel együtt a diszlokációk eloszlása is egyre inkább kiterjed a teljes térfogatra.

A fenti mechanizmus alapján nincs ok feltételezni azt, hogy alacsony hőmérsékleti ( $T < 0,4T_m$ ) deformációk során diszlokáció annihiláció lép fel, ennek következté-



ben a diszlokáció sűrűség továbbra is arányos marad a plasztikus munkával. Ezt a következtetést az ellenállás mérések egyértelműen alátámasztják (II/5.7. pont). A diszlokáció annihiláció valószínűtlenségét az is alátámasztja, hogy az alacsony hőmérsékleti deformáció után az egyszerűbb típusú (vacancia, intersticiális atom) ponthiba eltűnési folyamatok is csak viszonylag magas hőmérsékleteken (kb.  $-100\text{ }^{\circ}\text{C}$  —  $100\text{ }^{\circ}\text{C}$ ) aktiválódnak [114—117] még a nagy tisztaságú fémekben is.

A keresztcsúszás termikus aktiválása miatt a mikroszerkezetből kiszabaduló diszlokációk száma függvénye a hőmérsékletnek és az időnek. Ez utóbbi függés abban jelentkezik, hogy  $\Theta_{III}$  parameter függ az alakítás sebességétől. A diszlokációk kiszabadulásának hatását a III. szakasz alakítási keményedési sebességére ezért a következő fenomenológiai egyenlettel lehet figyelembe venni (polikristály csavarási deformációja esetén):

$$\left(\frac{d\tau}{d\gamma}\right)_3 = \left(\frac{d\tau}{d\gamma}\right)_0 + \left(\frac{\partial\tau}{\partial t}\right)_T \cdot \frac{\partial t}{\partial \gamma}, \quad (117)$$

ahol a jobboldali deriváltak indexei nem pontosan termodinamikai jelentésűek. A 0 index „ $T=0\text{ K}^{\circ}$ ” körüli, vagy pontosabban termikus aktiválás nélküli alakításra, a  $T$  index pedig termikus aktiválás hatása alatt történő alakításra vonatkozik.

A termikusan aktivált keresztcsúszások következtében beálló mikroszerkezet „gyengülés” úgy fogható fel, mintha az anyagban az alakítás során részleges megújulás következne be. Ezt a folyamatot nevezhetjük dinamikus megújulásnak, de hangsúlyozni kell, hogy ez lényegesen különbözik pl. a  $0,5T_m$  fölötti hőmérsékleti stacionárius kúszás során fellépő dinamikus megújulástól, ahol a folytonos diszlokáció annihiláció tart egyensúlyt az alakváltozás miatt keletkező diszlokációk okozta keményedéssel [118].

A megújulás (diszlokáció kiszabadulás) sebességének jellemzésére bevezetjük a következő mennyiséget [93]:

$$v_m = -\frac{\left(\frac{\partial\tau}{\partial t}\right)_T}{\chi_2 \dot{\gamma}}; \quad \chi_2 = \left(\frac{\partial\tau}{\partial \gamma}\right)_0, \quad (118)$$

ahol  $\chi_2 \dot{\gamma}$  az időbeni sebessége a keményedésnek megújulás nélkül (ez a keményedés lép fel a II. szakaszban). Behelyettesítve (118)-at (117)-be, a III. szakaszbeli keményedési sebességre a következő kifejezést kapjuk:

$$\left(\frac{d\tau}{d\gamma}\right)_3 = \chi_2(1 - v_m), \quad \tau > \tau_3. \quad (119)$$

Kiszámíthatjuk a keményedés sebességét a (104), (107) egyenletekből is (csavarási deformációra). Az eredmény:

$$\left(\frac{d\tau}{d\gamma}\right)_3 = \chi_2 \frac{\tau_3 - \tau_{30}}{\tau - \tau_{30}} = \chi_2 \left(1 - \frac{\tau - \tau_3}{\tau - \tau_{30}}\right). \quad (120)$$

Ez azt jelenti, hogy a megújulás sebessége mérhető paraméterekkel kifejezve a következő:

$$v_m = \frac{\tau - \tau_3}{\tau - \tau_{30}}, \quad \tau > \tau_3. \quad (121)$$

## 6.2. A IV. szakasz makroszkopikus leírása

A IV. szakasz tulajdonságait fenomenológiailag értelmezhetjük a következőképpen. Az a tény, hogy a parabolikus keményedés nem ad felső határt az alakítással elérhető folyási feszültségre, matematikailag a következőképpen fejezhető ki:

$$\frac{d\tau}{d\gamma^{1/2}} = \chi_3 = \text{áll.}, \quad T = \text{áll.} \quad (122)$$

Egy olyan keményedési törvény meghatározásához, amely telítési feszültséghez vezet, fel kell tételeznünk, hogy létezik egy olyan  $\tau_4$  feszültség, amely fölött a (122) egyenlet már nem érvényes, hanem a keményedés „sebessége”,  $d\tau/d\gamma^{1/2}$  monoton csökken növekvő folyási feszültséggel. A legegyszerűbb összefüggés, amely teljesíti ezt a feltételt a következő:

$$\frac{d\tau}{d\gamma^{1/2}} = \chi_3 - \alpha(\tau - \tau_4), \quad \tau \geq \tau_4, \quad (123)$$

ahol  $\alpha$  és  $\tau_4$  állandó, amelyek függhetnek a hőmérséklettől és az anyagi minőségtől. Ez az összefüggés kielégíti a (113) egyenletet is. Látható továbbá, hogy a (123) egyenlet integrálja a (111) alatti függvényt állítja elő, ha  $\alpha = \gamma_4^{-1/2}$ , és (114)-gyel megegyezésben a következő telítési feszültségre vezet:

$$\tau_s = 2\chi_3\gamma_4^{1/2} + \tau_{30}. \quad (124)$$

Ez utóbbi egyenlet segítségével megbecsülhetjük azt a legnagyobb folyási feszültséget, amely egy polikristályos felületcentrált köbös fém alakítási keményedésével csavarási deformáció során elérhető. A (109) összefüggés felhasználásával  $T=0$ -ra kapjuk:

$$\tau_s \cong \frac{\mu}{85},$$

ami természetesen felső határt jelent és közelítőleg a harmada az elméleti kritikus nyírási feszültségnek. A III. táblázatban megadott adatokból látható, hogy a telítési feszültség szobahőmérsékleten ehhez képest kb. felére vagy harmadára csökken. Mivel az így megkeményedett anyagok tiszta nyújtással szembeni folyáshatára is legfeljebb ezeknek az adatoknak a  $\sqrt{3}$ -szorosa, ezért eredményünk elvi megalapozását adja annak a jól ismert ténynek, hogy a tiszta fémek viszonylag nagy alakítások hatására sem érnek el nagy szilárdsági paramétereket.

A IV. szakasz kialakulásának mikroszerkezeti magyarázatát még nehezebbnek tűnik jelen ismereteink szerint megadni mint az előző szakaszokét. Az ilyen nagy alakváltozások eredményeként kialakuló rendkívül bonyolult diszlokáció szerkezet közvetlen megfigyelése jelenleg reménytelennek tűnik, mert a preparálási eljárás során a vizsgált mintákban — az igen nagy és heterogén eloszlású belső feszültségek miatt — jelentős változások lépnek fel. Ugyanakkor a nagy diszlokáció sűrűség miatt a megmaradó diszlokáció szövedék sem tanulmányozható az elektronmikroszkópok véges felbontóképessége miatt [70].

Valószínűnek tűnik, hogy a IV. szakasz kialakulása szoros kapcsolatban van a kitüntetett orientációjú szerkezet (textúra) képződésével. Ennek alapján érthető



lenne a telítési feszültség fellépése, mert az egyirányú szemcsék fokozódó kialakulásával stacionárius diszlokáció szerkezet jöhet létre. Ezt a következtetést alátámasztani látszik az a tény, hogy a nagymértékben deformált polikristályok viselkedése erősen hasonlóná válik az egykristályokéhoz, függetlenül az orientációjuktól [103]. A kitüntetett orientációjú szemcsék képződése során nem túl alacsony hőmérsékleten olyan mikroszerkezet alakulhat ki, amelyben lehetőség van a diszlokáció annihilációra és ez eredményezheti a stacionárius diszlokáció szerkezetet, azaz a telítési feszültség fellépését. Nagyon alacsony hőmérsékleten azonban a törés a legtöbb deformációs mód esetén bekövetkezik, mielőtt ez az állapot létrejöhessen.

## IRODALOM

1. E. Orowan, Z. Physik, 89, 605, 1934.
2. M. Polányi, Z. Physik, 89, 660, 1934.
3. G. J. Taylor, Proc. Roy. Soc. A145, 362, 1934.
4. A. H. Cottrell, Dislocations and Plastic Flow in Crystals, Clarendon Press, Oxford, 1953.
5. A. Seeger, Z. Naturf. 9a, 758, 1954.
6. J. Friedel, Les Dislocations, Guthier-Villars, Paris, 1956.
7. U. F. Kocks, Phil. Mag. 13, 541, 1966.
8. A. S. Argon, Physics of Strength and Plasticity, ed. A. S. Argon, Cambridge, MIT, p. 217.
9. T. H. Alden, Phil. Mag. 25, 785, 1972.
10. T. H. Alden, Met. Trans. 4, 1047, 1973.
11. P. Feltham, J. Phys. D: Appl. Phys., 6, 2048, 1973.
12. J. R. Rice, J. Appl. Mech. 37, 728, 1970.
13. R. Hill and J. R. Rice, J. Appl. Math. 25, 448, 1973.
14. J. R. Rice, J. Mech. Phys. Solids, 19, 433, 1971.
15. U. F. Kocks, A. S. Argon and M. F. Ashby, Thermodynamics and Kinetics of Slip. Progress in Materials Science, Vol. 19. Pergamon Press, Oxford, 1975.
16. I. Kovács and E. Nagy, phys. stat. sol. 8, 795, 1965.
17. J. R. Rice, Constitutive Equations in Plasticity, ed. A. S. Argon, M. I. T. Press, Cambridge, Mass. 1975.
18. I. N. Sneddon and D. S. Berry, Handbuch der Physik, ed. S. Flügge, Vol. VI. Springer Verlag, Berlin, 1958. p. 123.
19. M. B. Bever, D. L. Holt and A. L. Titchener, The Stored Energy of Cold Work, Progress in Materials Science, Pergamon Press, Oxford, 1973.
20. I. Prigogine, Introduction to Thermodynamics of Irreversible Processes, John Wiley, New York, 1967.
21. P. W. Bridgman, Rev. Mod. Phys. 22, 56, 1950.
22. B. de Saint Venant, Comp. Rend. 70, 473, 1870.
23. A. Haar und T. von Karman, Gött. Nachricht. Math. Phys. 204, 1909.
24. R. von Mises, Gött. Nachricht. Math. Phys. 582, 1913.
25. H. Hencky, Z. Angew. Math. Mech. 3, 241, 1923.
26. L. Prandtl, Proc. I. Int. Congr. Appl. Math. (Delft), 1924. p. 43.
27. E. Reuss, Z. Angew. Math. Mech. 10, 266, 1930.
28. A. Nádai, Theory of Flow and Fracture in Solids, Vol. II. McGraw Hill, New York, 1963.
29. A. A. Iljuszin, Plaszticsnoszty, Akad. Nauk., Moszkva, 1963.
30. M. F. Kanninen, et al (eds), Inelastic Behaviour of Solids, McGraw Hill, New York, 1970.
31. L. M. Kachanov, Foundations of the Theory of Plasticity, North Holland Publ. Co., Amsterdam, 1971.
32. F. A. Mc Clintock and A. S. Argon, Mechanical Behaviour of Materials, Addison Wesley Publ. Co., Reading, Massachusetts, 1966.
33. I. N. Sneddon and R. Hill (eds), Progress in Solid Mechanics, Vol. I—IV. North Holland Publ. Co., Amsterdam, 1961—1963.
34. Kovács I. és Zsoldos L., Diszlokációk és képlékeny alakváltozás, Műszaki Kiadó, Budapest, 1965.
35. F. R. N. Nabarro, Theory of Crystal Dislocations, Clarendon Press, Oxford, 1967. p. 83.



36. *H. Tresca*, Mém. prés, par. div. savants, 18, 733, 1868.
37. *U. F. Kocks*, Met. Trans. 1, 1121, 1970.
38. *R. Hill*, Proc. Roy. Soc. A326, 131, 1972.
39. *J. Weertman*, Phil. Mag. 11, 1217, 1965.
40. *R. de Wit*, J. Appl. Phys. 39, 137, 1968.
41. *L. M. Brown*, Phil. Mag. 10, 445, 1964.
42. *P. de Chatel* and *I. Kovács*, phys. stat. sol. 10, 213, 1965.
43. *A. Seeger*, Handbuch der Physik VII., Springer Verlag, Berlin, 1958.
44. *E. Schmid*, Proc. Internat. Congr. Appl. Mech., Delft 1924. p. 342.
45. *N. Thompson*, Proc. Phys. Soc. B66, 481, 1953.
46. *G. J. Taylor* and *C. F. Elam*, Proc. Roy. Soc. 108, 28, 1925.
47. *F. R. N. Nabarro*, *Z. S. Basinski* and *D. B. Holt*, Adv. Phys. 13, 193, 1964.
48. *A. Seeger* (ed), Moderne Probleme der Metallphysik I., Springer Verlag, Berlin 1965. p. 35.
49. *A. Seeger*, *S. Mader* and *H. Kronmüller*, Electronmicroscopy and Strength of Crystals, eds. G. Thomas and J. Washburn, Interscience, New York, 1963. p. 665.
50. *C. R. Cupp* and *B. Chalmers*, Acta Met. 2, 803, 1954.
51. *R. W. Cahn* (ed.), Physical Metallurgy, North Holland, Amsterdam, 1970.
52. *T. H. Blewitt*, *R. R. Coltman* and *J. K. Redman*, Defects Cryst. Solids, The Physical Society, London, 1955. p. 369.
53. *H. G. van Bueren*, Imperfections in Crystals, North Holland, Amsterdam, 1961.
54. *J. P. Hirth* and *J. Lothe*, Theory of Dislocations, McGraw Hill, New York, 1968.
55. *I. Kovács* and *L. Zsoldos*, Dislocations and Plastic Deformation, Akadémiai Kiadó, Budapest, 1973.
56. *Kovács I.*, Magyar Fiz. Folyóirat, 13, 181, 1965.
57. *Chatel P. és Kovács I.*, Magyar Fiz. Folyóirat, 13, 383, 1965.
58. *Kovács I. és Chatel P.*, Magyar Fiz. Folyóirat, 14, 15, 1966.
59. *Kovács I.*, Magyar Fiz. Folyóirat, 18, 1, 1970.
60. *D. Kuhlmann-Wilsdorf*, Trans. AIME, 224, 1047, 1962.
61. *P. B. Hirsch*, Acta Cryst. 13, 1114, 1960.
62. *N. F. Mott*, Trans. AIME, 218, 962, 1960.
63. *J. P. Hirth* and *J. Weertman* (eds.), Report on Symposium on Work Hardening, Gordon and Breach, New York, 1968.
64. Ottawai konferencia anyaga, Can. J. Phys. 45, (1967).
65. *A. Seeger*, The Relation Between the Structure and the Mechanical Properties of Metals, Vol. I., S. H. O. M., London 1963. p. 4.
66. *U. Essmann*, phys. stat. sol. 3, 932, 1963.
67. *U. Essmann*, Acta Met. 12, 1468, 1964.
68. *U. Essmann*, phys. stat. sol. 17, 725, 1966.
69. *U. Essmann* and *H. Strunk*, Z. Metallk. 61, 67, 1970.
70. *H. Mughrabi*, Phil. Mag. 23, 869, 897, 931, 1971.
71. *H. Mughrabi*, Constitutive Equations in Plasticity, ed. A. S. Argon, M. I. T. Press, Cambridge, Mass. 1975.
72. *J. W. Edington*, Phil. Mag. 19, 1189, 1969.
73. *J. W. Steeds* and *P. M. Hazzledine*, Discuss. Faraday Soc. 38, 103, 1964.
74. *J. W. Steeds*, Proc. Roy. Soc. A292, 343, 1966.
75. *I. Kovács*, Acta Met. 15, 1731, 1967.
76. *I. Kovács*, Acta Phys. Hung. 15, 65, 1962.
77. *P. Feltham*, Metallurgia, 70, 55, 1964.
78. *P. Feltham* and *J. Spears*, phys. stat. sol. 13, K123, 1965.
79. *S. Ceresara*, *H. Elkholy* and *T. Federighi*, phys. stat. sol. 8, 795, 1965.
80. *R. Kamel* and *T. H. Youssef*, Acta Met. 15, 965, 1967.
81. *J. Polák*, Czech. J. Phys. B19, 315, 1969.
82. *F. Thom*, phys. stat. sol. 38, 467, 1970.
83. *S. R. Mitchell* and *H. J. Dawson*, Met. Trans. 1, 1205, 1970.
84. *M. R. Soliman*, *F. H. Hammad* and *G. A. Hassan*, Acta Phys. Hung. 30, 399, 1971.
85. *M. R. Soliman*, *F. H. Hammad* and *G. A. Hassan*, phys. stat. sol. (a) 4, K151, 1971.
86. *M. R. Soliman*, *G. A. Hassan* and *F. H. Hammad*, J. Inst. Metals, 99, 134, 1971.
87. *M. R. Soliman*, *G. A. Hassan* and *F. H. Hammad*, J. Mat. Sci. 6, 177, 1971.
88. *F. H. Hammad*, *G. A. Hassan* and *M. R. Soliman*, Aluminium, 48, 134, 1971; 49, 275, 1973.
89. *I. Kovács* and *E. Nagy*, phys. stat. sol. 3, 726, 1963.



90. *I. Kovács and P. Feltham*, phys. stat. sol. 3, 2379, 1963.
91. *I. Kovács, E. Nagy and P. Feltham*, Phil. Mag. 8, 797, 1964.
92. *Kovács I.*, A képlékeny alakváltozás mechanizmusának vizsgálata felületcentrált köbös fémeken Kandidátusi disszertáció, 1966, Magyar Fiz. Folyóirat, 15, 125, 1967.
93. *I. Kovács*, Reviews Def. Beh. Materials, in press.
94. *G. I. Taylor*, J. Inst. Metals, 62, 307, 1938.
95. *H. F. W. Bishop and R. Hill*, Phil. Mag. 42, 418, 1298, 1951.
96. *A. Nádai*, Theory of Flow and Fracture of Solids, 2d. ed. Vol. I. McGraw Hill Co., New York 1950. p. 347.
97. *H. G. Grewe und E. Kappler*, phys. stat. sol. 6, 339, 1964.
98. *H. P. Stüwe*, Z. Metallk. 55, 699, 1964; 56, 633, 1965.
99. *J. E. Hockett and O. D. Sherby*, J. Mech. Phys. Solids, 23, 87, 1975.
100. *J. S. Diehl, S. Mader and A. Seeger*, Z. Metallk. 46, 650, 1955.
101. *A. Seeger, J. Diehl, S. Mader and H. Rebstock*, Phil. Mag. 2, 323, 1957.
102. *J. F. Bell*, Phil. Mag. 10, 107, 1964; 11, 1135, 1965.
103. *U. F. Kocks, H. S. Chen, D. A. Rigney and R. J. Schaefer*, in Work Hardening, J. P. Hirth and J. Wertman (eds.) New York, Gordon and Breach, 1968.
104. *G. Saada*, Acta Met., 9, 166, 1961.
105. *H. R. Peiffer*, Acta Met. 11, 435, 1963.
106. *P. Feltham*, phys. stat. sol. 6, 235, 1964.
107. *Z. S. Basinski and A. Saimoto*, Can. J. Phys. 45, 1161, 1967.
108. *Z. S. Basinski, J. S. Dugdale and A. Howie*, Phil. Mag. 8, 1989, 1963.
109. *J. G. Rieder and C. T. B. Foxon*, Phil. Mag. 16, 1113, 1967.
110. *F. R. Fickett*, Cryogenics, 11, 349, 1971.
111. *J. K. Mackenzie*, Thesis, Bristol, 1949.
112. *P. Feltham*, J. Phys. D: Appl. Phys. 6, 2048, 1973.
113. *P. Feltham*, Reviews Def. Beh. Materials, 1, 1, 1974.
114. *S. Ceresara, H. Elkholy and T. Federighi*, Phil. Mag. 12, 1205, 1965.
115. *S. Ceresara, M. Conserva and P. Fiorini*, Mat. Sci. Eng. 9, 19, 1972.
116. *E. Kovács-Csetényi and I. Kovács*, Realstruktur und Eigenschaften von Reinststoffen, Akademie-Verlag, Berlin, 1967. p. 709.
117. *I. Kovács and B. Sas*, Phil. Mag. 34, 937, 1976.
118. *I. Kovács and H. El Sayed*, J. Mat. Sci. 11, 529, 1976.
119. *D. McLean*, Rep. Progr. Phys. 29, 1, 1966.

# KONTINUUM IMPULZUSMÉRLEGÉNEK KORREKCIÓJA AZ OTT-FÉLE TRANSZFORMÁCIÓ ALAPJÁN\*

TAKÁCS CSABA

Nehézipari Műszaki Egyetem, Fizikai Tanszék, Miskolc

Elsőként Ott mutatott rá 1963-ban megjelent cikkében arra, hogy a speciális relativitáselméletben a hő transzformációjára vonatkozó Planck-féle formula hibás. Az Ott nevéhez fűződő új transzformáció egyik következménye, hogy az impulzustétel hagyományos alakja javításra szorul: az impulzusváltozás mechanikai és termikus részből áll.

Dolgozatunkban a hő Ott-féle transzformációjára támaszkodva előállítjuk a kontinuumok impulzusmérlegének korrigált alakját. (Az impulzus konduktív áramsűrűsége és forrása egy-egy új taggal bővül.)

Söderholm — Møller eredményét általánosítva — 1968-ban kimutatta, hogy tetszőleges kontinuum véges kiterjedésű darabjára a hőimpulzus és a hő bizonyos folyamatok esetén négyes vektort alkot.

Ezt az eredményt itt némileg más úton származtatjuk le, és olyan erőterre is kiterjesztjük, amelynek hőforrása zérustól különböző.

## Jelölések

Szimbolikus alak használatakor a hármas vektorok betűjele fölé nyilat helyezünk, a másodrendű hármas tenzor betűjele fölött  $\wedge$  jel áll. A diadikus szorzást  $\circ$  jelöli. A skaláris szorzatban a tényezőket szorzójel nélkül egymás mellé írjuk. A dolgozatban végig Minkowski-koordinátákat használunk, az eseménykoordináták jele  $x_1, x_2, x_3$  és  $x_4 = ict$ . Indexes írásmódban követni fogjuk az összegzési konvenciót; a latin betűs indexek értéke 1, 2, 3 vagy 4, a görög betűsöké pedig 1, 2 vagy 3 lehet. A  $\partial/\partial x_\alpha$  differenciáloperátor szimbolikus jele  $\nabla$ ,  $d\vec{a}$  a felületelem-vektor,  $dv$  a térfogatelem,  $d\omega = dv dx_4/i$  a téridő intervallumeleme,  $\delta_{ik}$  a Kronecker-szimbólum. A felső indexként írt  $^0$  jel utal arra, hogy az illető mennyiség a sajátrendszerre vonatkozik.

A kontinuum néhány gyakrabban előforduló fizikai jellemzőjének betűjele:  $\vec{v}$  (sebesség),  $\gamma = (1 - v_\alpha v_\alpha/c^2)^{-1/2}$ ,  $\vec{p}$  (impulzussűrűség),  $\hat{\sigma}$  (rugalmas feszültség),  $\hat{\pi}$  (impulzus-áramsűrűség),  $w$  (energiasűrűség),  $\vec{\varphi}$  (hőáramsűrűség),  $\vec{S}$  (energia-áramsűrűség). Az erőter intenzitását (az erőssűrűséget)  $\vec{F}$ , hőforrását  $\psi$  jelöli.

\*Érkezett 1976. szept. 6.



## Bevezetés

Mint a transzportfolyamatok fizikájának elemeiből ismeretes [1], a  $\varrho^{(n)}$   $n$  méretű sűrűségobjektummal leírt extenzív mennyiségre fennáll a

$$\frac{\partial \varrho^{(n)}}{\partial t} + (\varrho^{(n)} \circ \vec{v} + j^{(n+1)}) \nabla = s^{(n)}$$

ún. mérlegegyenlet; itt  $\varrho^{(n)} \circ \vec{v}$  a konvektív,  $j^{(n+1)}$  a konduktív áramsűrűség,  $s^{(n)}$  pedig a forrás.

Legyen a vizsgált extenzív mennyiség az impulzus. Ekkor a newtoni impulzustételből a

$$\frac{\partial \vec{p}}{\partial t} + (\vec{p} \circ \vec{v} - \hat{\sigma}) \nabla = \vec{F} \quad (1)$$

mérlegegyenlet adódik, tehát a konduktív áramsűrűség  $-\hat{\sigma}$ , a forrás  $\vec{F}$ . Az energia-mérleget a termodinamika első főtételeiből kapjuk:

$$\frac{\partial w}{\partial t} + (w\vec{v} - \vec{v}\hat{\sigma} + \vec{\varphi}) \nabla = \vec{F}\vec{v} + \psi; \quad (2)$$

látható, hogy  $\vec{j} = -\vec{v}\hat{\sigma} + \vec{\varphi}$  és  $s = \vec{F}\vec{v} + \psi$ .

A relativisztikus kontinuumfizikában az impulzus és az energia jellemzői szorosan összefonódnak: egyazon négyes tenzornak — az energiaimpulzus-tenzornak — a komponensei:

$$T_{i\kappa} = \pi_{i\kappa}, \quad T_{i4} = icp_i, \quad (3)$$

$$T_{4\kappa} = \frac{i}{c} S_{\kappa}, \quad T_{44} = -w.$$

Éppen ezért elgondolkodtató az (1), (2) rendszer bántó aszimmetriája: míg az energia konduktív áramsűrűsége és forrása mechanikai és termikus részre tagolódik, az impulzus megfelelő jellemzői termikus részt nem tartalmaznak. Ez azzal a meglepő következménnyel jár, hogy ha valamely kontinuumponthoz  $\hat{\sigma}^0$  eltűnik, de  $\vec{\varphi}^0$  különbözik zérustól, akkor a kontinuum transzportfolyamatainak leírásához választott  $I$  inerciális vonatkoztatási rendszerben az illető kontinuumponthoz általában nem feszültségmentes [2]. A rugalmas erő  $\gamma$ -szorosa tehát nem úgy transzformálódik, mint egy négyes vektor térszerű része.

A hőre vonatkozó Lorentz-transzformációs formula levezetésében Planck felhasználja az (1) impulzustételt, és így a

$$Q = Q^0/\gamma$$

eredményre jut.

### Az energia és az impulzus áramsűrűsége

Az Ott híres cikkében [3] megadott

$$Q = \gamma Q^0 \quad (4)$$

transzformációs képlet helyességét azóta számos szerző támasztotta alá meggyőző termodinamikai, illetve statisztikus mechanikai érvekkel. Møller [4] egy a hőtanban fontos szerepet játszó egyszerű folyamat igen gondos elemzése során jut el a (4) formulához, és rámutat arra, hogy a Planck-féle levezetésben a hibás pont az impulzusváltozás és az erőimpulzus egyenlőségének a feltételezése: valójában — az energia-változáshoz hasonlóan — az impulzusváltozásnak is van termikus része (hőimpulzus).

A következőkben megvizsgáljuk, milyen korrekcióra szorul az (1) impulzusmérleg. Feltesszük, hogy a kontinuumnak nincs spinje, továbbá azt is, hogy a materiális térfogatelemén eloszló impulzusforrásnak és a kontinuumelem egyes határlapjain eloszló konduktív impulzusáramnak mint vektorrendszernek az eredője egyaránt csak vektor (nem vektorcsavar). Ekkor az impulzusmomentum mérlegéből [5] következik, hogy a kontinuum  $T_{ik}$  energiaimpulzus-tenzora szimmetrikus, azaz

$$\pi_{ix} = \pi_{xi}, \quad (5)$$

$$S_i = c^2 p_i. \quad (6)$$

A sajátrendszerben elfogadjuk a konduktív áramsűrűségek hagyományos kifejezését:

$$\pi_{ix}^0 = -\sigma_{ix}^0, \quad (7)$$

$$S_i^0 = \varphi_i^0. \quad (8)$$

A pontmechanikából átvesszük, hogy az erő komponenseit  $\gamma$ -val megszorozva egy négyes vektor térszerű komponenseit kapjuk. Ennek alapján a feszültség transzformációs formulája előállítható. Ha  $I$ -t és a sajátrendszert a speciális Lorentz-transzformáció kapcsolja össze, akkor [6]

$$[\sigma_{ix}] = \begin{bmatrix} \sigma_{11}^0 & \gamma \sigma_{12}^0 & \gamma \sigma_{13}^0 \\ \sigma_{21}^0/\gamma & \sigma_{22}^0 & \sigma_{23}^0 \\ \sigma_{31}^0/\gamma & \sigma_{32}^0 & \sigma_{33}^0 \end{bmatrix},$$

vagyis

$$\begin{aligned} \hat{\sigma} &= \hat{\sigma}^0 + (\gamma - 1) \frac{\vec{v} \circ (\vec{v} \hat{\sigma}^0)}{v^2} + \left( \frac{1}{\gamma} - 1 \right) \frac{(\hat{\sigma}^0 \vec{v}) \circ \vec{v}}{v^2} - \\ &- \left( \gamma + \frac{1}{\gamma} - 2 \right) \Sigma^0 \frac{\vec{v} \circ \vec{v}}{v^4}, \quad \Sigma^0 = \vec{v} \hat{\sigma}^0 \vec{v}. \end{aligned} \quad (9)$$

Forgassuk most el a tértengelyeket  $I$ -ben is, a sajátrendszerben is, és pedig úgy, hogy a két forgatás mátrixa egyezzen meg. A két új koordináta-rendszert az

$$\alpha_{ix} = \delta_{ix} + \frac{\gamma - 1}{v^2} v_i v_x, \quad \alpha_{i4} = -\alpha_{4i} = \frac{i}{c} \gamma v_i, \quad \alpha_{44} = \gamma \quad (10)$$

transzformációs mátrix köti össze [6]. Nyilván (10) a legáltalánosabb fizikailag érdekes Lorentz-transzformáció. Természetesen a (9) szimbolikus alakú formulán



az azonos mértékű térbeli forgatás nem változtat, azonban a sebességnek most már általában egyik komponense sem tűnik el.

A hő transzformációjára a (4) Ott-féle képletet fogadjuk el. Speciális Lorentz-transzformációt feltételezve  $da_1 = da_1^0$ ,  $da_2 = da_2^0/\gamma$ ,  $da_3 = da_3^0/\gamma$  ( $da_i$  olyan felületelem, melynek normálisa az  $x_i$  tengely). Felhasználva még az idődilatáció  $dt = \gamma dt^0$  képletét a hőáramsűrűségekre a

$$[\varphi_i] = \begin{bmatrix} \varphi_1^0 \\ \gamma\varphi_2^0 \\ \gamma\varphi_3^0 \end{bmatrix}$$

transzformációs szabályt kapjuk; ennek szimbolikus alakja:

$$\vec{\varphi} = \gamma\vec{\varphi}^0 - (\gamma - 1) \frac{\Phi^0 \vec{v}}{v^2}, \quad \Phi^0 = \vec{\varphi}^0 \vec{v}. \quad (11)$$

(11) már a (10) Lorentz-transzformáció esetében is érvényes.

Az 1. fejezetben mondtak szerint

$$-w = T_{44} = \alpha_{r4} \alpha_{s4} T_{rs}^0.$$

(10), (3), (7), (8) és (6) felhasználásával ebből a

$$\gamma^2 w^0 = w + \frac{\gamma^2}{c^2} (\Sigma^0 - 2\Phi^0) \quad (12)$$

összefüggés következik.

Másrészt

$$\frac{i}{c} S_i = T_{4i} = \alpha_{r4} \alpha_{si} T_{rs}^0,$$

s innen — az előbbi eljárást követve —

$$\vec{S} = -\gamma\vec{v}\hat{\sigma}^0 - \frac{\gamma(\gamma-1)}{v^2} \Sigma^0 \vec{v} + \left( \frac{\gamma^2}{c^2} + \gamma \frac{\gamma-1}{v^2} \right) \Phi^0 \vec{v} + \gamma\vec{\varphi}^0 + \gamma^2 w^0 \vec{v} \quad (13)$$

Használjuk most fel (12)-t, (11)-et és a (9)-ből adódó

$$\vec{v}\hat{\sigma} = \gamma\vec{v}\hat{\sigma}^0 - \frac{\gamma-1}{v^2} \Sigma^0 \vec{v}$$

formulát, akkor az energia áramsűrűségére a hagyományos

$$\vec{S} = w\vec{v} - \vec{v}\hat{\sigma} + \vec{\varphi}$$

kifejezés áll elő.

Tekintsük végül a

$$\pi_{ix} = T_{ix} = \alpha_{ri} \alpha_{sx} T_{rs}^0$$

transzformációt. A behelyettesítések és némi rendezés után a

$$\begin{aligned} \hat{\pi} = & - \left[ \hat{\sigma}^0 + \frac{\gamma-1}{v^2} \vec{v} \circ (\vec{v}\hat{\sigma}^0) \right] + \left[ - \frac{\gamma-1}{v^2} (\hat{\sigma}^0 \vec{v}) - \right. \\ & \left. - \frac{(\gamma-1)^2}{v^4} \Sigma^0 \vec{v} + \frac{1}{c^2} \left( \gamma\vec{\varphi}^0 + 2\gamma \frac{\gamma-1}{v^2} \Phi^0 \vec{v} + \gamma^2 w^0 \vec{v} \right) \right] \circ \vec{v} + \frac{\gamma}{c^2} \vec{v} \circ \vec{\varphi}^0 \end{aligned} \quad (14)$$

formára juthatunk. Az első szögletes zárójelben álló kifejezést alakítsuk át (9) segítségével, s vegyük tekintetbe, hogy (5) és (7) következtében  $\hat{\sigma}^0$  szimmetrikus, tehát  $\hat{\sigma}^0 \vec{v} = \vec{v} \hat{\sigma}^0$ . Összevonás után (14) az alábbi alakba megy át:

$$\hat{\pi} = -\hat{\sigma} + \frac{1}{c^2} \left( -\gamma \vec{v} \hat{\sigma}^0 - \gamma \frac{\gamma-1}{v^2} \Sigma^0 \vec{v} + \gamma \vec{\varphi}^0 + 2\gamma \frac{\gamma-1}{v^2} \Phi^0 \vec{v} + \gamma^2 w^0 \vec{v} \right) \circ \vec{v} + \frac{\gamma}{c^2} \vec{v} \circ \vec{\varphi}^0.$$

Vessük össze  $\hat{\pi}$ -nek ezt a kifejezését (13)-mal, és használjuk fel (6)-ot:

$$\hat{\pi} = -\hat{\sigma} + \vec{p} \circ \vec{v} + \frac{1}{c^2} \vec{v} \circ \left[ \gamma \vec{\varphi}^0 + \left( \gamma \frac{\gamma-1}{v^2} - \frac{\gamma^2}{c^2} \right) \Phi^0 \vec{v} \right].$$

A szögletes zárójelbe foglalt összegről (11) alapján könnyű belátni, hogy éppen  $\vec{\varphi}$ -t adja. Így

$$\hat{\pi} = \vec{p} \circ \vec{v} - \hat{\sigma} + \frac{1}{c^2} \vec{v} \circ \vec{\varphi}. \quad (15)$$

Az impulzus konduktív áramsűrűsége tehát kibővül a  $c^{-2} \vec{v} \circ \vec{\varphi}$  termikus taggal, amelynek az impulzustételben szereplő divergenciája általában a sajátrendszerben sem zérus. A nemrelativisztikus határesetben azonban — a  $c^{-2}$  szorzó miatt — a járulékl eltűnik.

### Az energia és az impulzus forrása

A ponderábilis kontinuum  $T_{ik}$  és az erőtér  $\theta_{ik}$  energiainpulzus-tenzorának összege a teljes energia és impulzus megmaradása miatt divergenciamentes. Bevezetve az  $f_i = -\partial \theta_{ik} / \partial x_k$  négyes erőssűrűséget az említett megmaradási tételek a

$$\frac{\partial T_{ik}}{\partial x_k} = f_i$$

tömör formulában foglalhatók össze. Az  $f_i$  négyes vektor térszerű része a ponderábilis anyag  $\vec{R}$  impulzusforrása, időszerű része pedig a kontinuum energiaforrásának ( $i/c$ )-szerese.

A sajátrendszerben érvényesnek fogadjuk el a nemrelativisztikus fizika

$$R_i^0 = F_i^0, \quad (16)$$

$$e^0 = \psi^0 \quad (17)$$

kifejezéseit.

A hármas erőssűrűség transzformációs szabályát az erőtranszformációból és a  $dv = dv^0/\gamma$  Lorentz-kontrakciós képletből nyerjük:

$$\vec{F} = \vec{F}^0 + \frac{\gamma-1}{v^2} (\vec{F}^0 \vec{v}) \vec{v}, \quad (18)$$

a hőforrás pedig  $dv dt$  invariáns volta miatt ugyanúgy transzformálódik, mint a hő:

$$\psi = \gamma \psi^0. \quad (19)$$



Az

$$\frac{i}{c} e = f_4 = \alpha_{r4} f_r^0$$

összefüggésből kiindulva (16), (17), (19) és a (18)-ból kapható

$$\vec{F}\vec{v} = \gamma \vec{F}^0 \vec{v}$$

felhasználásával a hagyományos

$$e = \vec{F}\vec{v} + \psi$$

kifejezés adódik az energia forrására.

Más a helyzet az impulzusforrással. Az

$$R_i = f_i = \alpha_{ri} f_r^0$$

transzformációs szabályból (18) segítségével rövid úton az

$$\vec{R} = \vec{F} + \frac{1}{c^2} \psi \vec{v} \quad (20)$$

kifejezéshez jutunk. Az impulzusnak tehát termikus forrása is van. A  $c^{-2} \psi \vec{v}$  új tag a nemrelativisztikus határesetben természetesen eltűnik.

### A négyes hőimpulzus

Az  $A$  határfelületű  $V$  materiális térfogatban foglalt kontinuum a  $(t_1, t_2)$  időintervallumban ponderábilis környezetétől hő formájában

$$Q = - \int_{t_1}^{t_2} \left( \oint_A \vec{\phi} d\vec{a} \right) dt \quad (21)$$

energiát vesz fel. Gauss tételével (21) a megfelelőbb

$$Q = - \frac{1}{c} \int_{\Omega_{12}} (\vec{\phi} \nabla) d\omega \quad (22)$$

alakba írható át; itt  $\Omega_{12}$  az a téridő-intervallum, amelyet a kontinuumdarab világcsöve, illetve a  $t=t_1, t=t_2$  hipersíkok határolnak.

(15) szerint a ponderábilis környezet a kontinuumdarab impulzusát nemcsak a jól ismert

$$\vec{I} = \int_{t_1}^{t_2} \left( \oint_A \hat{\sigma} d\vec{a} \right) dt$$

erőimpulzus révén változtatja meg, hanem a

$$\vec{G} = - \frac{1}{c^2} \int_{t_1}^{t_2} \left[ \oint_A (\vec{v} \circ \vec{\phi}) d\vec{a} \right] dt \quad (23)$$

hőimpulzus révén is. Írjuk (23)-at a

$$\vec{G} = -\frac{1}{c^3} \int_{\Omega_{12}} [(\vec{v} \circ \vec{\varphi}) \nabla] d\omega \quad (24)$$

formába.

Az állandó nyugalmi tömegű pont mechanikájából ismeretes, hogy a  $[\Delta \vec{P}, \frac{i}{c} \Delta E]$  négyes objektum vektor ( $\Delta \vec{P}$  az impulzus,  $\Delta E$  az energia megváltozása). Ez a szabály kontinuumdarabra — kivételes folyamatoktól eltekintve — nem érvényes. Møller azonban kimutatta [4], hogy egy a hőtanban gyakran szereplő folyamatra a

$$[G_i] = \left[ \vec{G}, \frac{i}{c} Q \right]$$

négyes hőimpulzus vektor. Söderholm pedig Møller eredményét kiterjesztette hőforrásmentes erőterben áramló tetszőleges kontinuum olyan folyamataira, amelyek előtt és után elegendően hosszú ideig a kontinuumban hőáramok nincsenek [7]. Mint a következőkben látni fogjuk, Söderholm eredménye érvényben marad a  $\psi \neq 0$  esetben is, ám ilyenkor  $G_i$  kibővíthető az erőter hőimpulzusával, illetve az erőter által közölt hővel.

Jelölje  $u_i$  a kontinuum  $[\gamma \vec{v}, i c \gamma]$  négyes sebességét,  $P_{ik}$  pedig a  $\delta_{ik} + u_i u_k / c^2$  ún. projektort. Tekintsük a

$$q_i = -P_{ik} u_r T_{kr} \quad (25)$$

négyes vektort [8]; a (25) definícióból belátható, hogy

$$q_i^0 = \varphi_i^0, \quad q_4^0 = 0,$$

emiatt  $q_i$ -t négyes hőáramsűrűségnek nevezhetjük.

A  $q_i, \varphi_\kappa$  mennyiségek között a

$$q_i = \alpha_{\kappa i} \varphi_\kappa^0,$$

$$q_4 = \alpha_{\kappa 4} \varphi_\kappa^0$$

transzformációs egyenletekből kiindulva teremthetünk kapcsolatot. Felhasználva (11)-et és a belőle adódó

$$\vec{\varphi} \vec{v} = \vec{\varphi}^0 \vec{v}$$

formulát a

$$\left. \begin{aligned} q_i &= \frac{1}{\gamma} \varphi_i + \frac{\gamma}{c^2} (\varphi_\kappa v_\kappa) v_i, \\ q_4 &= \frac{i}{c} \gamma \varphi_\kappa v_\kappa \end{aligned} \right\} \quad (26)$$

összefüggések adódnak. (26)-ból  $\varphi_i$  könnyen kifejezhető:

$$\varphi_i = \gamma \left( q_i + \frac{i}{c} q_4 v_i \right).$$



Helyettesítsük be most (24)-be és (22)-be a hármas hőáramsűrűségnek ezt a kifejezését: a két képlet a

$$G_i = -\frac{1}{c^3} \int_{\Omega_{12}} \frac{\partial}{\partial x_k} \left[ u_i (q_k + \frac{i}{c} q_4 v_k) \right] d\omega \quad (27)$$

formulában egyesíthető. Az integranduszt írjuk át a

$$\frac{\partial}{\partial x_k} (u_i q_k) + \frac{i}{c} \left[ \frac{\partial}{\partial t} (u_i q_4) + \frac{\partial}{\partial x_k} (u_i q_4 v_k) \right]$$

alakba. Az analízisből jól ismert

$$\frac{d}{dt} \int_V f dv = \int_V \left[ \frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_k} (f v_k) \right] dv$$

azonosságot az idő szerint  $t_1$  és  $t_2$  között integrálva előáll az

$$\int_{V(t_2)} f(t_2) dv - \int_{V(t_1)} f(t_1) dv = \frac{1}{c} \int_{\Omega_{12}} \left[ \frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_k} (f v_k) \right] d\omega$$

forma. Azonosítsuk az  $f$  téridőfüggvényt  $u_i q_4$ -gyel. Látható, hogy (27)-et így is írhatjuk:

$$G_i = -\frac{1}{c^3} \int_{\Omega_{12}} \frac{\partial}{\partial x_k} (u_i q_k) d\omega - \frac{i}{c^3} \left[ \int_{V(t_2)} (u_i q_4) dv - \int_{V(t_1)} (u_i q_4) dv \right]. \quad (28)$$

Jelölje  $\Omega_0$  a téridőnek azt az intervallumát, amelyet a kontinuumdarab világcsöve és a folyamat kezdetéhez, illetve végéhez tartozó hiperfelület zár közre. Feltételezzük, hogy

a) a világcső belsejében van olyan  $\Omega_0$ -hoz időben alulról csatlakozó  $\Omega_-$  intervallum, illetőleg időben felülről csatlakozó  $\Omega_+$  intervallum, amelyekben a hőáramsűrűség eltűnik;

b)  $\Omega_-$  és  $\Omega_+$  „elégge nagy”, azaz minden inerciarendszerben van olyan  $t=t_1$ , illetve  $t=t_2$  hipersík, melynek a világcső belsejével alkotott metszete teljes egészében  $\Omega_-$ -ban, illetőleg  $\Omega_+$ -ban fekszik.

Ilyen folyamatok esetén (28) jobb oldalán a második és harmadik integrál zérus, és  $G_i$  a folyamathoz tartozó négyes hőimpulzust jelenti. Nevezzük az  $\Omega_-$ ,  $\Omega_0$ ,  $\Omega_+$  intervallumok egyesítését  $\Omega$ -nak. Az  $\Omega_{12}$  integrációs tartomány helyett  $\Omega$  is vehető, hiszen az  $\Omega - \Omega_{12}$  tartományon az integrandusz minden inerciarendszerben eltűnik. Végeredményben

$$G_i = -\frac{1}{c^3} \int_{\Omega} \frac{\partial}{\partial x_k} (u_i q_k) d\omega. \quad (29)$$

(29)-ből világosan látszik, hogy  $G_i$  vektor.

A kontinuumdarabban az erőter a  $(t_1, t_2)$  intervallumban

$$\Psi = \int_{t_1}^{t_2} \left( \int_V \psi dv \right) dt = \frac{1}{c} \int_{\Omega_{12}} \psi d\omega$$

hőt közöl, az erőter hatására bekövetkező impulzusváltozás pedig (20) szerint a

$$\vec{J} = \int_{t_1}^{t_2} \left( \int_V \vec{F} dv \right) dt$$

erőimpulzus mellett magában foglalja a

$$\vec{\Gamma} = \frac{1}{c^2} \int_{t_1}^{t_2} \left( \int_V \psi \vec{v} dv \right) dt = \frac{1}{c^3} \int_{\Omega_{12}} \psi \vec{v} d\omega$$

hőimpulzust is. Bevezetjük a

$$[\Gamma_i] = [\vec{\Gamma}, \quad \frac{i}{c} \Psi]$$

négyes hőimpulzust; tekintettel (19)-re

$$\Gamma_i = \frac{1}{c^3} \int_{\Omega_{12}} \psi^0 u_i d\omega. \quad (30)$$

(30)-ban az integrandusz vektor, tehát ha  $\Omega_-$ -ban és  $\Omega_+$ -ban  $\psi=0$ , akkor az erőter négyes hőimpulzusa is vektor a folyamatra. Nyilvánvaló most már, hogy a ponderábilis környezet és az erőter együttes termikus hatását kifejező  $G_i + \Gamma_i$  mennyiség is vektorként transzformálódik.

#### IRODALOM

1. Fényes I., Termosztatika és termodinamika, Műszaki Könyvkiadó, Bp., 1968.
2. Takács Cs., Transzportfolyamatok leírása a relativisztikus kontinuummechanikában. Egyetemi doktori értekezés, NME, 1974.
3. H. Ott, Zs. f. Phys. 175, 70, 1963.
4. C. Möller, Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk. 36, 16, 1968.
5. R. A. Grot—A. C. Eringen, Int. J. Engng Sci. 4, 611, 1966.
6. Novobátzky K., A relativitás elmélete, Tankönyvkiadó, Bp., 1963.
7. L. Söderholm, Nuovo Cimento, 57B, 173, 1968.
8. C. Eckart, Phys. Rev. 58, 919, 1940.





# KÖNYVISMERTETÉS

**P. Bradshaw (szerk.) : Turbulence.  
Topics in Applied Physics Springer-Verlag, 1976.**

A könyv első, bevezető fejezetének első mondata így hangzik: „A turbulenciára vonatkozó egyik, senki által sem vitatott állítás az, hogy ez a folyadékáramlások legbonyolultabb típusa.” Nem kevésbé szignifikáns a könyv előszavának első mondata: „Az impulzus, a hő és a tömeg *turbulens* transzportja dominál a fizikai, műszaki és általában a környezetünkben tapasztalt folyadékáramlások legnagyobb részében.” Az utóbbi állítás hangsúlyozza a turbulens áramlások vizsgálatának fontosságát, az előző pedig aktualitását: a turbulens áramlások témakörében — éppen az áramlás bonyolultsága következtében — sok még a megoldásra váró feladat.

A turbulenciával foglalkozó szakkönyvek legnagyobb része egy-egy speciális szempontból tárgyalja a turbulens áramlások tulajdonságait. Helyesnek bizonyult a szerkesztőnek az az elgondolása, hogy a turbulencia *széles körű* tárgyalása csak több-szerzős szakkönyvben várható. A könyv tartalma nemes ötvezete az „elméleti” és az „alkalmazott” fizikai szemléletmódnak.

A könyv első fejezete (P. Bradshaw munkája) általános bevezető: tartalmazza mindazokat az elméleti tudnivalókat, amelyek a turbulencia leírásához és alkalmazásához — és a könyv további fejezeteinek megértéséhez — szükségesek. A következő három fejezet a különböző peremfeltételek mellett kialakuló turbulens áramlások tulajdonságainak a leírásával foglalkozik. (Szerzőik: H. H. Fernholz, J. P. Johnston, P. Bradshaw és J. D. Woods.) Az 5., 6. és 7. fejezet témája az, hogyan lehet az alapegyenletek segítségével elméletileg leírni az előző fejezetekben ismertetett turbulens áramlásokat. A 7. fejezet speciálisan összefoglalja a hosszú láncú polimérekben kialakuló turbulens áramlásokra vonatkozó elméleti eredményeket. (E fejezetek szerzői: W. C. Reynolds, T. Cebeci, B. E. Launder, J. L. Lumley.)

Egyik fejezet szerzője sem törekszik teljességre; inkább bevezető a téma irodalmába és témakörébe. (A fejezetek végén bőséges irodalmi összefoglalás található.) A könyv mindazoknak a fizikusoknak és mérnököknek nélkülözhetetlen szakkönyvként ajánlható, akik a folyadékáramlások elméleti és kísérleti alapjait ismerik.

(Szabó János)

**J. Brey—R. B. Jones (szerkesztők): Critical Phenomena.  
Lecture Notes in Physics, 54. Springer-Verlag, 1976.**

A könyv a Sitges Statisztikus Mechanikai Nemzetközi Iskola előadásait tartalmazza. Nem kezdőknek, hanem olyan fizikusoknak ajánlható, akik e témakör alapjait jól ismerik. Meggyőző információ lehet a könyv tartalomjegyzéke: F. J. Wegner: Critical Phenomena and Scale Invariance; M. S. Green: Invariance Properties of the Renormalization Group; Shang-Keng Ma: Scale Transformations on Dynamic Models; C. P. Enz: Critical Dynamics in Fokker-Planck Formalism; P. Szépfalusi: Dynamic Critical Phenomena and the Renormalization Group — Application to a Lattice Dynamic Model; R. Haag: The Algebraic Approach to Quantum Statistical Mechanics. Equilibrium States and Hierarchy of Stability; S. Miracle-Solé: Theorems on Phase Transitions with a Treatment for the Ising Model; J. L. Lebowitz: Statistical Mechanics of Equilibrium Systems: Some Rigorous Results; G. Gallavotti: Probabilistic Aspects of Critical Fluctuations; L. P. Kadanoff: The Application of Renormalization Group Techniques to Quarks and Strings; R. Brout: The Role of Spontaneous Broken Symmetry.

Az instabilitások, a fluktuációk, a fázisátalakulások, ill. általánosabban: a kritikus jelenségek



témaköre a statisztikus fizika legdinamikusabban fejlődő fejezete. A barcelonai Sitges Iskola előadói — vagyis a könyv szerzői — e témakör nemzetközileg elismert művelői. Doktoranduszoknak, a kritikus jelenségekkel, fázisátalakulásokkal foglalkozó, ill. foglalkozni kívánó fizikusoknak ebben a témakörben jobb forrásmunka aligha ajánlható.

(Szabó János)

**W. Nörenberg, H. A. Weidenmüller: Introduction to the Theory of Heavy-Ion Collisions  
Lecture Notes in Physics, 51. Springer-Verlag, 1976.**

A nehéz-ion reakciók megismerése új vizsgálati módszert adott a magfizikusok kezébe; az új nehéz-ion források új lehetőségeket tartak fel a nagyenergiájú fizikában és a magfizikában. Ezek a lehetőségek maris meglepő eredményekre vezettek; gondoljunk pl. a szupernehéz elemek felfedezésére, az atommagban kialakuló lökeshullámok felismerésére, a nagy spinkvantumszámú állapotokra, stb.

A nehéz-ion reakciók egzakt kvantummechanikai leírása a legtöbb esetben — matematikai nehézségek miatt — nem lehetséges. Szerencsére a legtöbb esetben a jelenség leírására jó közelítést ad a klasszikus natáreset, ill. a hidrodinamikai leírásmód.

A nehéz-ion ütközések legegyszerűbb — és sok esetben egyetlen elfogadható — leírása a klasszikus mechanika alapján lehetséges. Ezze! a leírásmóddal foglalkoznak a szerzők a 2. fejezetben, majd, a következő fejezetben összefoglalják az ütközések legfontosabb, általános tulajdonságait. Az ionütközések legrészletesebben ismert típusával: a rugalmas ütközésekkel az 5. fejezet foglalkozik. Az előző fejezet az atommagok szóródásának leírását tartalmazza. A Coulomb-gerjesztések tulajdonságainak attekintése után a rugalmatlan szórás ismertetése következik, majd a 8. fejezetben az erősen rugalmatlan szórások és a közbenső-mag reakciók statisztikus elméletével foglalkoznak a szerzők.

Az utolsó, 9. fejezetben a nehéz-ion reakciók néhány atom- és szilárdtest-fizikai alkalmazásával ismerkedhet meg az olvasó: vakanciák keletkezése a belső héjakon, szupernehéz atomok belső elektronnéjai, pozitronprodukción szuperkritikus térben.

A könyv, amely a szerzők Heidelbergben az 1973—74. tanévben tartott előadásait tartalmazza, csupan a nem-relativisztikus kvantummechanika és az elemi magfizika ismeretét kívánja meg az olvasótól. Tárgyalásmódja világos, a bonyolultabb matematikai levezetéseket ügyesen tömöríti; ilyenkor megelégszenek a szerzők a fizikai és matematikai premisszákat megadásával és a végkonklúziók világos és részletes elemzésével. A könyv értékét növeli a határterületi alkalmazások ismertetése, ill. vazolása. Minden fizikus talál benne hasznos tudnivalót.

(Szabó János)

**H. Cabannes (szerk.): Padé Approximants Method and Its Applications to Mechanics.  
Lecture Notes in Physics, 47. kötet. Springer-Verlag, 1976.**

Henri Eugène Padé (1863—1953) az Ecole Normale Supérieure Tudományos Közleményeiben 1892-ben közölte azt az azóta híressé vált dolgozatát, amelyben érdekes módszert ismertetett egy függvény racionális törtfüggvényekkel való gyors közelítésére. Ez a Padé-féle módszer széleskörű alkalmazásra talált a mechanikában (elsősorban a hidromechanikában); a számítástechnikai gépek alkalmazása óta mind a fizikusok, mind a mérnökök, mind pedig a matematikusok körében megélenkült az érdeklődés a Padé-féle közelítő módszer iránt.

Az Európai Mechanikai Szimpóziumon (Toulon, 1975) több előadás foglalkozott a Padé-féle közelítő módszer hidrodinamikai alkalmazásával. Itt merült fel az a gondolat, hogy a módszer matematikai alapjaival, továbbfejlesztésével és mechanikai alkalmazásaival foglalkozó dolgozatokat a Lecture Notes in Physics sorozat külön kötetben adja közre.

A könyv anyaga három részre oszlik. Az első fejezetben a Padé-féle közelítő módszer matematikai elméletével foglalkozó dolgozatok olvashatók. A második fejezet dolgozatai a Padé-féle módszer hidrodinamikai alkalmazásaival foglalkoznak. Nem kevésbé hasznos és érdekes a könyv harmadik fejezete: a Padé-féle közelítő módszer elméletére és alkalmazásaira vonatkozó irodalom gondosan összeállított, csaknem teljes bibliográfiája. A könyvhöz H. Cabannes írt briliáns előszót.

(Szabó János)



G. Falk—W. Ruppel: *Energie und Entropie*. Springer-Verlag, 1976.

A könyv a *Die Physik des Naturwissenschaftlers* sorozatban a *Mechanik-Relativität-Gravitation* utáni kötet. Független az előbbtől, önmagában zárt egység. Célja a kezdő fizikust, fizikokémist kielégíteni, de a mérnökök és más természetkutatók vagy megfelelő tárgyat tanító tanárok is hasznosan forgathatják.

A könyv szellemes ábrái már külsőleg is vonzzák az olvasót, segítik a fizika egyik legabsztraktabb részének megértését. Targyalási módja olyan, hogy benne a termodinamika nem hótan, hanem a fizikának az a része, amely a természet általános viselkedését írja le. Feldolgozási módja is kidomborítja ezt a felfogást, amennyiben a hőmérséklet és az entrópia szisztematikus tárgyalására csak a könyv második fejezetében kerül sor. A legmagasabb matematikai követelmény a parciális differenciálás, amelynek szukséges szabályait a könyv végén másfél oldal tartalmazza.

A könyv nagy gondot fordít a fizikai mennyiségek és állapotok, mint alapvető fogalmak közötti összefüggés megértésére. Így egy fizikai rendszer nem felépítési módjával, hanem állapotaival van jellemezve, vagy másképpen szólva: azzal a móddal, ahogy a hozzá tartozó fizikai mennyiségek egymással kapcsolódnak. A fizikai mennyiség fogalmanak centrális szerepére példa a részecskeszám, mint egy anyag tömegének mértéke. Ennek a mennyiségnek a következetes alkalmazása arra kényszerít, hogy a „részecske” egységét éppen úgy elfogadjuk, mint a  $6 \cdot 10^{23}$  részecske = 1 mól egységet. Így azután egy részecskére vonatkoztatva vannak megadva a könyvvégi táblázatokban a természeti állandók.

A könyv a föltételek és szerepük bemutatásával végződik. A teljes alkalmazás, a termodinamikai potenciálfüggvények ismertetése majd egy következő kötetben kap helyet.

(T. GY.)

R. Beck, W. Englisch, K. Gürs: *Table of Laser Lines in Gases and Vapors*. Springer-Verlag, 1976.

Valóban, ahogyan a szerzők is írják a könyv bevezetőjében, a kvantumelektronikával foglalkozó kutatók sokszor kényszerülnek az irodalom részletes tanulmányozására, hogy egy kívánt laser vonalat megtaláljanak és felhasználhassák. Ezért az eddig megtalált laser vonalak összegyűjtése és könyv alakjában való publikálása feltétlenül indokolt és hasznos annál is inkább, mert tudomásom szerint ilyen összefoglaló laservonal táblázat csupán laseres könyvek függelékeként került csak publikálásra (pl. C. S. Willett: *An Introduction to gas Lasers: Population Inversion Mechanism*; C. C. Davis, T. A. King: *Gaseous Ion Lasers, Advances in Quantum Electronics*, Vol. 3 ed. D. W. Goodwin, Academic Press, London, New-York 1975.)

A könyvben közreadott anyag a Springer kiadásoknak megfelelően friss, csak legfeljebb nem teljes. Ez persze tekintve, hogy a terület gyorsan és sokrétűen fejlődik, igen fontos lenne. Illusztrálásul szolgáljon a KrF eximer laser. A hivatkozott cikkekkel egyidőben jelent meg G. C. Tisone, A. K. Hays, J. M. Hoffman cikke egy 100 Mw teljesítményű 5,6 joule energiaű KrF laserről, amelyet a könyv nem tartalmaz, és a csúcsteljesítményre ezen lasereknél csupán 0,5 Mw-ot ad meg. A felhasználás szempontjából a laser teljesítménye legalább annyira fontos mint a hullámhossz. És ehhez kapcsolódik a következő megjegyzésem. Nagyon hasznos lenne, ha a laser vonalak hullámhosszán kívül a megfigyelt teljesítményt, a laser működésének impulzus vagy folytonos voltát is lehetne rögtön tudni a megfelelő hivatkozásokkal és átmenet azonosítással együtt. Gondolom ez megtehető lenne, hiszen a fent már idézett könyvek függelékeiben ezt már megtalálhatjuk. (Természetesen meg kell jegyeznünk, hogy ezek a táblázatok a közölt összvonalszámot illetőleg kisebbek.)

Néhány sajtóníva zavarólag hat. Példa legyen a réz laser, ahol a hivatkozás kulcs-cikke (362) hibásan van megadva, illetve oly mértékben van a (369) számú hivatkozással összekeverve, hogy a réz laserre vonatkozó bázis cikket nem lehet megtalálni. Ezért az összes közölt adat használhatatlan. Itt egy magyar vonatkozású megjegyzés: a réz laser fejlesztésében magyar kutatók is vettek részt (Jánossy Mihály, Csillag László és Rózsa Károly), sőt egyes vonalakat elsőként publikáltak. Jólesett volna látni a rájuk való hivatkozást.

Összességében a könyv nagyon hasznos és reméljük a következő kiadásokban egy teljesebb anyagot tartalmazó könyvet fogunk üdvözölhetni.

(B. J.)



**Interplanetary Dust and Zodiacal Light**  
**Lecture Notes in Physics 48. Springer-Verlag, 1976.**

A könyv az NSZK-beli, Heidelbergben a Nemzetközi Csillagászati Unió által 1975. június 10. és 13. között rendezett kollokvium eredményeit foglalja össze. A kollokviumot az IAU három kommissziója szervezte: a 15. (Üstökösök, kisbolygók és meteoritok fizikai tanulmányozása,) a 21. (Az éjjeli égbolt fényessége) és a 22. (Meteorok és a bolygóközi por). A kollokvium jelentőségét hangsúlyozza az a tény, hogy két nagy horderejű űrkísérletnek, a kisbolygók övezetét is átszelő Pioneer 10-nek és Pioneer 11-nek, valamint a Skylab űrállomásnak a bolygóközi poranyagra vonatkozó méréseit itt közzétették először.

A könyv öt nagy fejezetre tagozódik:

1. Az állatövi fény.
2. A bolygóközi por mérése „in situ”;
3. Az üstökösök pora.
4. Meteorok és kapcsolatuk a bolygóközi porral
5. A bolygóközi poranyag dinamikája, fejlődése.

Az első fejezetben az üresközökről végzett állatövi fény megfigyelésekről olvashatunk először, (Skylab, Helios, Pioneer, Apollo, OSO mérések). Egy érdekes eredmény: a Föld—Hold-rendszer librációs pontjaiban felgyülemlett porfelhő vidékén a színindex kissé kékebb, mint a környező égi háttér a porrészecskéken történő visszaverődés miatt. Feltételezik, hogy a földi atmoszféra által fókuszált kék napfény reflektálódik a porszemcsékről. (71. old.)

A második fejezetben a mérési módszerek és eredmények ismertetése után érdekes tanulmányt olvashatunk arról — J. S. Dohnányitól —, hogy az üstökösök vagy a kisbolygók járulnak-e hozzá nagyobb mértékben a bolygóközi tér porral szennyezéséhez. A szerző véleménye: az üstökösök, legalábbis a legkisebb részecskék tartományában. Ugyanebben a fejezetben ír J. B. Hartung a bolygóközi por fluxusának a holdi mikrokráterek gyakoriságából történő meghatározásáról is. J. W. Rhee egy olyan jelenségről ír, amelyet először a Surveyor 3. szonda fényképein figyeltek meg: a holdi felszín felett napnyugta után lebegő porrészecskékről. A szerző számításaival igazolja, hogy a Hold sötét oldalán mérhető néhány kilovoltos (negatív) potenciál elegendő ahhoz, hogy szubmikronos, sőt mikronos méretű porszemcséket leszakítson. A leszakadt, elektrosztatikusan „elhajított” részecske több száz kilométert utazhat, és 200 km magasságig is eljuthat. (238. old.)

A harmadik fejezet első cikkében A. H. Delsemme az üstökösök porvesztését becsüli meg. Megállapítja, hogy az interplanetáris tér a hosszú periódusú üstökösök porvesztésével töltődik fel, míg a rövidperiódusú üstökösök hozzájárulása a bolygóközi pormennyiséghez elenyésző. A fejezetben további cikkek szólnak az üstökösök porának optikai tulajdonságairól, az üstökösök porcsóvájáról, a Kohoutek üstökös porvesztéséről és „ellencsóvájáról.” A fejezet utolsó cikkében a CIT Sugárhajtási Laboratóriumának három kutatója az Encke üstökösre tervezett 1980. évi Mariner expedíció programját, lehetőségeit és szükségességét foglalja össze.

Peter M. Millman a negyedik fejezet bevezető cikkében összefoglalja azokat a meteor megfigyeléseket, amelyek alapján a bolygóközi por fluxusára, tömeg szerinti eloszlására, fizikai szerkezetére és kémiai összetételére következtethetünk. A fejezetben több cikk foglalkozik a meteorrajokkal, bolygóközi por áramlásokkal, a meteoroidok darabolódásával.

Az ötödik fejezetben több dolgozat foglalkozik a bolygóközi porszemcsék pályájának változásaival. E pályaváltozásokban a Poynting—Robertson effektus mellett az ütközés játszanak fontos szerepet. Befejezésül arra a cikkre hívnám fel a figyelmet, melyben két Baylor-egyetemi kutató becsapódási kísérleteiről számol be. Bazalt közetbe 4 km/sec sebességgel becsapódó milligramm tömegű test keltette részecskék néhány század százaléka elérte a becsült „holdi” szökési sebességet. A holdról a nagysebességű mikrorészecske becsapódások állandóan a bolygóközi térbe szállítanak ilyen pikogrammm tömegű részecskéket, melyek térbeli sűrűsége jól egyezik a Pioneer 8 és 9 méréseivel.

*Bérczi Szaniszló*



**A. Janner, T. Janssen, M. Boon: Group Theoretical Methods in Physics.  
Lecture Notes in Physics, Springer-Verlag, 1976.**

1972 óta évente rendeznek kollokviumot neves fizikusok és matematikusok részvételével a csoportelméleti módszerek fizikai alkalmazásai témakörében a legaktuálisabb témákról. A *Lecture Notes in Physics* 50. kötete az 1975-ben Nijmegenben megrendezett kollokvium előadásait tartalmazza. Ezen a kollokviumon a következő aktuális kérdéskörök legújabb eredményeit tartalmazó előadások hangzottak el: mérték csoportok és elemi részek; geometriai kvantálás; szimmetriasértés; koherens állapotok; atom-, molekula-, mag- és szilárdtestfizika; matematikai fizika; klasszikus mechanika; kvantummechanika térelmélet; statisztikus mechanika. A felkért előadók a témakörök nemzetközileg elismert kutatói voltak.

A kötet az előadások teljes terjedelmét tartalmazza.

(Nagy Károly)

**D. J. Simms—N. M. J. Woodhouse: Lectures on Geometric Quantization.  
Springer-Verlag, Lectures Notes in Physics. 53. kötet. 166 oldal**

A műről igen plasztikus képet nyújt a hozzá írott szerzői bevezetés, amelyből idézünk: „Jelen jegyzet D. Simms professzor 1974 őszén Londonban tartott tíz előadásán alapul, amelyekben ismertette B. Kostant és J. M. Souriau „geometriai kvantálási programját”. E program célja geometriai nyelven megfogalmazni a klasszikus és a kvantummechanika közti kapcsolatot, mint szimplektikus sokaságok (klasszikus fázistér) és Hilbert terek (kvantum fázistér) közti kapcsolatot. Bár valószínűtlen, hogy valaha is találjunk teljesen általános és természetes kvantálási konstrukciót, mégis az e programon folyó munka új betekintést adott a klasszikus és a kvantummechanika szimmetria elvei közti kapcsolatba, valamint a fizikus kvantálási elveinek kétértelműségeibe. Még sok munka van hátra, de máris koherens kép kezd kialakulni, legalábbis a véges sok szabadsági fokkal rendelkező rendszerek esetében (sokkal kevesebbet tudunk a mezőelméletekről és ezekkel itt nem is foglalkozunk): a klasszikus mechanikából úgy juthatunk el a kvantummechanikába, ha a klasszikus fázistérbe új geometriai struktúrát, ún. polarizációt vezetünk be. Bizonyos esetekben, ha pl. van egy természetes konfigurációs tér, vagy egy előírt szimmetria csoport (mint a Poincaré csoport) a polarizáció megválasztása többé-kevésbé meghatározott. Általában azonban a kvantálási konstrukció nem egyértelmű, különböző polarizációkkal nyert kvantumrendszerek csak a szemiklasszikus határátmenetben azonosak. A jegyzet rövid bevezetéssel kezdődik a szimplektikus geometriáról és annak szerepéről a Hamilton-mechanikában, majd a kvantálási konstrukció többé-kevésbé önálló leírásával és a polarizáció megválasztásától való függés tárgyalásával folytatódik. Feltételezzük, hogy az olvasó járatos a differenciálgeometria és az exterior-kalkulus elemeiben. A fentieket pusztán az utolsó mondat értelmezésével kell kiegészítenünk: az elemek a modern differenciálgeometria elemeit jelentik, s ez nálunk, sajnos, korántsem egyetemi anyag.

(Sz. D.)

**I. G. Körner, G. Kramer, D. Schildknecht (edit.): Current Induced Reactions.  
International Summer Institute on Theoretical Particle Physics in Hamburg 1975.  
Lecture Notes in Physics. Vol. 56. Springer-Verlag, 1976.**

A könyv a hamburgi Deutsches Elektronen Synchrotron (DESY) nevű kutatóintézetben 1975-ben rendezett elméleti részecskefizikai nyári iskolán elhangzott előadásokat tartalmazza. Az iskola programja a hadronfizika aktuális kérdéseit ölelte fel a rugalmatlan elektron-hadron ütközésektől kezdve a hadronok szerkezetére vonatkozó modelleken keresztül egészen a pszi-részecskékig. A részletesebb tájékozódás kedvéért közöljük az előadók nevét és az előadások címét: Meyer, H.: Inelastic Electron Scattering; Nambu, Y.: Descriptions of Hadronic Structure; Satz, H.: On the Phenomenology of Multihadron Production in  $e^+e^-$  Annihilation; Bjorken, J. D.: Hadron Final States in Deep Inelastic Processes; Höhler, G.: Dispersion Theory of Nucleon Form Factors; De Rujula, A.: The Discreet Charm of the New Particles; Sakurai, J. J.: Neutral Currents without Gauge Theory Prejudices; Stech, B.: Status of Broken Color Symmetry; Becher, U.: Production of New Particles by p-N Interactions; Pati, J. C.: Observable Quarks, Gluons and Leptons; Walsh, T. F.: More than Four Quarks?; Joos, H.: Quark Confinements; Nanopoulos, D. V.: Charmed Particles and Other Observable Consequences from Gauge Theories; Preparata, G.: Hadron Geometry and Quark Coordinates.

(Nagy Károly)



**Strukturdaten freier mehratomiger Molekeln**  
**Landolt—Börnstein Neue Serie, Gruppe II Band 7. Springer-Verlag, 1976.**

A 386 oldal terjedelmű kötet szerves és szervetlen molekulák 1960 és 1974 között gázfázisban végzett mikrohullámú, infravörös és Raman spektroszkópiái, továbbá elektrondiffrakciós mérések alapján számolt kötéstávolságok és vegyértékszögek tablazatos gyűjteménye.

A bevezetés röviden de igen tartalmasan végigfut az egyes mérési módszereken, vázlatosan közli az effektíve mérhető mennyiségeket és azokat a módszereket, melyek segítségével a struktúraadatok az előbbiekből megkaphatók. Az atomtávolságokra pl. tíz eltérő definíciót ad meg. Elemzi az egyes mérési módszerek főbb hibaforrásait és az adatok megbízhatóságát. Különös figyelmet szentel a molekulák gerjesztett állapotainak.

A könyv 848 molekula struktúra adatait tartalmazza. Ezek közül 355 szervetlen molekula. A rendezési elv a molekulák bruttó képletére alkalmazott alfabetikus sorrend. Egy-egy molekula esetében általában a következő adatokat adja meg: atomtávolságok és kötésszögek esetleges standard eltérésekkel, a mérési és számítási módszerek, az állapot szimmetriája, a molekula térbeli elrendeződésének vázlata, megjegyzések és irodalmi források. Egyes esetekben a forgási konstansokat is közli.

Abban az esetben, ha valamilyen molekulaállapotra különböző módszerekkel meghatározott, több geometriai adatot közöl, ezek az egyes mérési módok figyelemvétele alapján kompatibilisek. Ritkábban találjuk meg az atomok egyensúlyi koordinátáit. Több konformer esetén feltünteteti előbbieket megkülönböztető geometriai paramétereit, és meghatározott körülményekre vonatkozó egyensúlyi koncentrációit is.

A kötet utolsó táblázata a fontosabb molekula fizikai adatok forrásműveit közli.

A kötet igen jól kiegészíti a sorozat II/6 kötetét (kéttomos molekulák), továbbá a III/5, III/6, III/7 és III/8 köteteket (kristályszerkezetek). A könyv általános érdeklődésre tarthat számot mindazokon a területeken, ahol a molekulák geometriai adatai akár meghatározandó, akár felhasználó paraméterekként lényeges szerepet játszanak.

(Raksányi Kund)

**M. Mladjenovic: Development of Magnetic Beta-Ray Spectroscopy.**  
**Springer-Verlag, 1976.**

A „Lecture Notes in Physics” sorozatban megjelent 282 oldalas könyv áttekinti a mágneses béta-spektroszkópia egész múltját és jelenét.

Mindenekelőtt egy rövid történeti áttekintésben rögzíti a fejlődés legjelentősebb állomásait az 1910-es évek elejétől napjainkig.

A további tárgyalás során egy-egy fejezetet szentel a különböző spektrométer típusoknak: félkörfokuszálásúak a prizmatikus spektrométereknek (mágneses prizmák), a toroidális és trochoidális típusoknak, és egyet-egyet a különböző mágneses lencséknek (rövid, hosszú, közbenső). Ugyancsak külön-külön fejezet foglalkozik a különböző speciális két-irányban és magasabb rendben fókuszáló spektrométerek különböző típusaival.

Az egyes típusokat tárgyaló fejezetek előtt külön fejezetek foglalkoznak bizonyos általános kérdésekkel, mint a spektrométerek legfontosabb paraméterei és alkatrészei, a mágneses optika és az elektron mozgás alapvető vonásai és egyenletei, továbbá később — már a különböző spektrométereket tárgyaló fejezetek között — a mágneses tér szükséges és lehetséges korrekciói.

A könyv egy olyan fejezettel zárul, amelyik az optikai analógiára felépített mágneses spektrométereket ismerteti, vagyis azokat, amelyek két mágneses lencséből és köztük egy mágneses prizmából állnak.

Mladjenovic professzor könyve, amely az első monográfia az irodalomban a béta-spektrométerekről, tényleg jól követhető és — ami a mágneses spektroszkópiát illeti — teljes képet ad a béta-spektroszkópok különböző típusairól. Mladjenovic maga is aktívan dolgozott ezen a területen és a könyv anyaga is különböző egyetemeken tartott speciál-kollégiumok során (Belgrád, Róma, Kairó, Nashville) nyerte el jelenlegi formáját.

Amit meg kell jegyeznünk az az, hogy itt tényleg szinte csak magukról a spektrométerekről van szó, az egyéb instrumentális vonatkozások (mint pl. forrás preparálás, vagy detektálás) éppen, hogy szerepelnek, vagy egyáltalán nem is szerepelnek. Nincs szó a béta-spektroszkópia eredményeinek, tehát a mágneses béta-spektroszkópokkal kapott eredményeknek az áttekintéséről sem, amit pedig a cím alapján esetleg várhatna az olvasó. A terület gazdagságát mutatja, hogy még így is közel 300 lapos könyvre futotta az anyag. Mindenesetre talán vitatható, hogy egyes olyan típusok, amelyeknek



ma már csak történeti érdekessége van (pl. a mágneses lencse típusok) megérnek-e olyan részletes tárgyalást ma, mint ahogy az a könyvben történik. Megemlítem még, hogy a debreceni magfizikai iskola, az ATOMKI eredményeit a mágneses béta-spektroszkópia terén idézi és igen pozitívan értékeli a szerző.

(Berényi Dénes)

**K. Shimoda (ed.): High Resolution Laser Spectroscopy  
Topics in Applied Physics. Springer-Verlag, 1976.**

Ismét egy laser spektroszkópiával foglalkozó könyv a második ugyanezen könyvsorozatból. Nem véletlen, hiszen a terület gyorsan fejlődik — új módszerek — nagyhatású módszerek jelennek meg, amelyek azután természetesen gyorsan elterjednek a spektroszkópiai gyakorlatban.

K. Shimoda két írása Bevezetés és a spektrumvonalak szélesedéséről és keskenyedéséről írott a töle megszokott világossággal foglalja össze mindazon tudnivalókat, amelyek szükségesek a következő cikkek megértéséhez. Keretbe foglalja a kötet cikkeinek tartalmát és megmutatja helyüket a laser spektrometria területén.

P. Jacquinot az atomsugaras laseres spektroszkópiáról ír. Ez a cikk azért is nagyon érdekes, mert úgy látszott, hogy a laseres nagy felbontóképességű spektroszkópiai módszerek az atomsugaras módszerekkel megaladottakká teszik. Jacquinot megmutatja, hogy a laseres atomsugaras módszer miben ad többet, mint azok a módszerek, melyet a kötet többi cikkei tárgyalnak.

Letokhov jól ismert már a telítési spektroszkópia területén végzett munkája alapján is, amelyről most jelen cikkét írta. A cikk a terület világos, széles látószöggel megírt összefoglalója, szépen rámutatva a lehetséges további fejlődésre és a perspektivikus alkalmazásokra is.

Letokhov cikke részben tartalmazza a háromnívós laseres spektroszkópiát is, amelyről Chebotayev írt kimerítő ismertetőt. Az átfedés nem véletlen, hiszen a területek igen közel fekszenek és lényegében nem szétválaszthatók. Impresszívek a Letokhov cikkében közölt felbontóképességek  $10^8$ – $10^{15}$ , melyek elképzelhetetlenek a laserek nélkül.

A gyakorlatban  $\sim 10^{11}$  az a felbontóképesség, amelyet sikerült elérni, amely rekordot állító felbontóképességről J. L. Hall és J. A. Magyar számol be a metán és metilhalidok spektroszkópiái vizsgálatáról írott cikkükben. A metán és metilhalidok a hossz és frekvencia standard laserekben és laser frekvencia stabilitását biztosítják (lásd még Evenson és Petersen cikkét ugyanezen sorozat 2. kötetében) és ezért vizsgálatuk különösen indokolt.

Nemcsak két fényhullám, hanem két atomi nívó között is fellép interferencia — koherens gerjesztés esetén, aminek következtében az atom által kibocsátott fényhullámok között lebegés lép fel. Ez a jelenség a lebegés frekvenciájának megmérése útján spektroszkópiái vizsgálatok elvégzésére alkalmas. Erről a kvantum-lebegési spektroszkópiáról S. Haroche számol be cikkében, összehasonlítva a már ismertetett spektroszkópiai módszerekkel.

A legújabb laser-spektroszkópiái módszer, mely az összes többi módszerekhez hasonlóan kiküszöböli a mozgó atom Doppler vonalkiszéledését, a Doppler nélküli kétfotonos spektroszkópia. Ha az atom egymásnak szembefutó fénysugarakból az átmenethez szükséges egyik kvantumot az egyik, másikat a másik fénysugárból veszti, a Doppler effektus hatása kikompensálódik. Az abszorpció folyamatban a gáztérben levő minden atom résztvesz — szemben az előző módszerekkel (telítési spektroszkópia, három nívós spektroszkópia stb.), ahol csak a meghatározott sebességvektorral rendelkező atomok vettek rész a fénnel való kölcsönhatásban — és ezért a módszer „fényerősebb”. A kétfotonos nemlineáris abszorpció miatt a felbontás is jobb mint a lineáris módszereké. Így sorolhatnánk ezen módszer előnyeit. Erről a módszerről a nemzetközileg jól ismert szerzők N. Bloembergen és M. D. Levenson írt nagyon érdekes, gondolatokat ébresztő összefoglalót.

A kötet minden egyes cikkének szerzője már hosszú évek óta jólismert specialistája a referált területnek. A cikkek nagyon jól élvezhető kellemes olvasmányok. Az összefoglalások egészen a legutóbbi időkben megjelent publikációkat is tartalmazzák, teljeseek. Így elolvasva a cikkeket egy „up to date” képet lehet nyerni a laseres nagy felbontóképességű spektroszkópia dinamikusan fejlődő módszereiről és az elvégzett spektroszkópiái vizsgálatokról.

(Bakos József)

**A. I. van de Vooren—P. J. Zandbergen (edit.):  
Proceedings of the Fifth International Conference on Numerical Methods in Fluid Dynamics.  
Lecture Notes in Physics, Nr. 59. Springer-Verlag, 1976.**

Két könyv is megjelent a közelmúltban a Lecture Notes in Physics sorozatban ugyanebben a témában: a sorozat 35. és 41. kötete. Az előző kötet az ugyanilyen témájú 4. Nemzetközi Konferencia előadásait tartalmazza, az utóbbi pedig a belgiumi Kármán Intézetben szervezett hidrodinamikai



szeminárium előadásainak az anyagát adta közre. A jelen, 59. kötet a Folyadékmekanika Numerikus Módszerei témájú 5. Nemzetközi Konferencia anyagát tartalmazza. (A konferenciát 1976. június 28 és július 3 között Enschedében, Hollandiában tartották.) A konferencián két egyórás és négy félórás felkért előadás hangzott el; J. L. Lions: Szabad felszíni problémák megoldási módszerei; S. A. Ország; Turbulencia és átmeneti jelenségek; O. R. Burggraf; Viszkózus áramlásokkal kapcsolatos újabb eredmények; M. G. Hall: Hangsebesség körüli áramlások problémái; W. Loeve: Hangsebesség alatti sebességekkel kapcsolatos aerodinamikai áramlások és karakterisztikák; G. Schmid; Ritz — Galerkin — közelítés a hidrodinamikában.

Ezen kívül 53 előadás anyagát tartalmazza a kötet. Az előadások témája igazodik a konferencia elnevezéséhez.

Hasznos kézikönyv lehet a jelen kötet mindazoknak, akik a hidrodinamika elméleti kérdéseivel és alkalmazásaival foglalkoznak.

(Szabó János)

**A. Mooradian—T. Jaeger—P. Stokseth: Tunable Lasers and applications.  
Springer-Verlag, 1976.**

A hangolható hullámhosszú laser a spektroszkopus régi álma. Az első alkalmazások valóban a spektroszkópia területén történtek. A hangolható hullámhosszú koherens sugárzás azonban nemcsak a klasszikus spektroszkópia területén használható kiválóan, hanem kitágította magának a spektroszkópiának a fogalmát, megnövelte lehetőségeit. Ezen kívül persze új, igen praktikus alkalmazási lehetőségek is kínálkoztak, melyek között elsőnek kell említeni a laseres izotóp szeparációt. Az izotópok szeparációja kulcsfontosságú feladat az atomtechnikában, — és — nem könnyű feladat. Ma már, amikor atomerőművek üzemelnek szerte a világon, az izotóp szeparáció nagyiparrá vált. Nem kell tehát hangsúlyozni, hogy minden technikai tökéletesítés anyagi kihatása ezért igen jelentős. Ma a hangolható laserok felhasználásánál a döntő irányzat a lasernek izotóp szeparációra való felhasználása. A spektroszkópiái tény rég ismert és igen egyszerű. A különböző atommagoknak, azoknak is, amelyeknek csupán a súlya különböző és a töltése nem, különböző a spektrumuk. A spektrum alapján kiválogathatók az azonos magú atomok egy atomkeverékből. Természetesen a spektrumban a fellépő különbségek igen kicsinyek. Ezért igen kis sáv szélességű laserre van szükség, mely pontosan hangolható és a hullámhosszát változtatlanul tartja. Ezen kívül még nagy intenzitású is, hiszen a laser sugárzásának egy kvantuma egy atomot választ ki csupán. Egy mol mennyiséghez pedig  $10^{23}$  kvantumra van szükség, ha laser fényt 100 %-on hasznosítjuk. Az idea ugyanis a következő: A hangolható laserrel csak a kiszemelt izotóp atomjait gerjesztjük. Egy következő laser, melynek már nem kell nagyon monokromatikusnak lennie, ezeket a gerjesztett atomokat ionizálja. Az ionok kémiai reakcióba lépnek és így kémiaiilag vagy elektromos térrel elválaszthatók.

A Springer könyvsorozat ezen tagja egy konferencia anyaga, mely hangolható laserokról és azok alkalmazásáról szól. Ma már 57 nm-től 100  $\mu$  hullámhosszig találhatunk hangolható laserrel cikket az irodalomban. Természetesen az ultraibolya és a közeli infravörös tartomány a legérdekesebb, hisz ezeket használjuk az uranium szeparálásában, az egyiket az ionizálásra, a másikat a gerjesztésre. Az első szekció az ultraibolya laserrel (az különösen érdekes és sok újdonságot tartalmaz), a második infravörös laserrel, míg a harmadik ezeknek az izotópszeparációban való felhasználásával foglalkozott. A gerjesztésnek mint alapfolyamatnak tulajdonságai vizsgálata a negyedik, majd egyéb laser térben lejátszódó molekula alapfolyamatok az ötödik szekció anyaga.

A hatodik szekció a lasernek az atmoszférában lejátszódó kémiai folyamatok felderítésében való szerepével foglalkozott. (Részletesebb információt ezekkel a kérdésekkel kapcsolatban a Springer Topics of Applied Physics sorozatának 14. kötetében találhatunk.)

Nagyon érdekesek a fotobiológiai alkalmazások. A laserrel nagyon meghatározott kémiai kötetést lehet felbontani s ezáltal molekula biológiai „sebészetet” csinálni, sejtszétválasztást, DNS multiplifikációs folyamatot elindítani stb. Ez a VII. szekció anyaga. A spektroszkópiái alkalmazásokkal már sok könyv foglalkozott (A Springer Applied Physics sorozatának 2. és 13. kötete például). Ezen a területen elért újabb eredmények a VIII. szekció anyagát képezik.

A könyv gyors publikáció. Ezért néhol a kis betűtípus miatt nehéz olvasni. Kárpótól azonban a gyors megjelenése, mely ezen esetben (konferencia anyag) különösen fontos.

(Bakos József)





Technikai szerkesztő: Turchányi György  
A kiadásért felelős az Akadémiai Kiadó igazgatója — Műszaki szerkesztő: Agócs András  
A kézirat beérkezett: 1976. november 19. — Terjedelem: 8,75 (A/5) ív  
76-4926 — Szegedi Nyomda — F. v.: Dobó József

A MAGYAR  
TUDOMÁNYOS AKADÉMIA  
MATEMATIKAI ÉS FIZIKAI TUDOMÁNYOK  
OSZTÁLYÁNAK

# KÖZLEMÉNYEI

Matematikai, fizikai, csillagászati dolgozatokat, referátumokat, könyvismertetéseket, a Tudományos Minősítő Bizottságnak a III. Osztályra vonatkozó híreit s a III. Osztály híreit közli. Évenként egy kötet (kb. 40 ív) jelenik meg (négy szám alkot egy kötetet).

A Közlemények előfizetési ára kötetenként, azaz évenként 60 Ft. Belföldi megrendelések az Akadémiai Kiadó, 1363 Budapest V., Alkotmány u. 21. Pénzforgalmi jelzőszámunk 215-11 488, külföldi megrendelések a „Kultúra”

Könyv- és Hírlap Külkereskedelmi Vállalat,

1011 Budapest I., Fő utca 32.

Pénzforgalmi jelzőszám: 218-10 990 útján eszközölhetők.



## TARTALOMJEGYZÉK

<i>Tóth Árpád</i> : A lakószobák levegőjében várható radon-, valamint toron-koncentráció becslése és a számított értékek kísérletes ellenőrzése .....	95
<i>Tóth Árpád</i> : Lakószobákban várható gammadózis-intenzitás becslése és a számított adatok kísérletes ellenőrzése .....	105
<i>Kovács István</i> : Felületcentrált köbös fémek alakítási keményedése .....	113
<i>Takács Csaba</i> : Kontinuum impulzusmérlegének korrekciója az Ott-féle transzformáció alapján .....	175

## KÖNYVISMERTETÉS

<i>P. Bradshaw</i> (szerk.): Turbulence .....	185
<i>J. Brey—R. B. Jones</i> (szerkesztők): Critical Phenomena .....	185
<i>W. Nörenberg, H. A. Weidenmüller</i> : Introduction to the Theory of Heavy-ion Collisions .....	186
<i>H. Cabannes</i> (szerk.): Padé Aproximants Method and Its Applications to Mechanics .....	186
<i>G. Falk, W. Ruppel</i> : Energie und Entropie .....	187
<i>R. Beck, W. Englisch, K. Gürs</i> : Table of Laser Lines in Gases un Vapors .....	187
Interplanetary Dust and Zodiacal Light .....	188
<i>A. Janner, T. Janssen, M. Boon</i> : Group Theoretical Methods in Physics .....	189
<i>D. J. Simms, N. M. J. Woodhouse</i> : Lecture on Geometric Quantization .....	189
<i>I. G. Körner, G. Kramer, D. Schildknecht</i> (edit.): Current Induced Reactions .....	189
Strukturdaten feier mehratomiger Molekeln Landolt—Börnstein Neue Serie .....	190
<i>M. Mladjenovic</i> : Development of Magnetic Beta-Ray Spectroscopy .....	190
<i>K. Shimoda</i> (ed.): High-Resolution Laser Spectroscopy .....	191
<i>A. I. van de Vooren, P. J. Zandbergen</i> (edit.): Proceedings of the Fifth International Conference on Numerical Methods in Fluid Dynamics .....	191
<i>A. Mooradian—T. Jaeger—P. Stokseth</i> : Tunable Lasers and Applications .....	192

✓ 307.226

IV

# MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

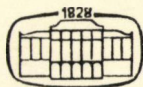
A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA  
III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

KOVÁCS ISTVÁN, NAGY ELEMÉR,  
PÁL LÉNÁRD ÉS SZALAY SÁNDOR  
KÖZREMŰKÖDÉSÉVEL

SZERKESZTI  
JÁNOSSY LAJOS

XXV. KÖTET

3. FÜZET



AKADÉMIAI KIADÓ  
MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA  
BUDAPEST 1977

2



# MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

## A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADEMIA III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

KIADÓHIVATAL: 1363 BUDAPEST V., ALKOTMÁNY UTCA 21. SZ.

A Magyar Fizikai Folyóirat a magyar fizikus kutatók lapja. A lap célja a magyar fizikai kutatás korszerű szinten való támogatása, elsősorban összefoglaló jellegű cikkek, tanulmányok stb. közlése által. Ilyen dolgozatok megjelentetésével a lap tájékoztatást kíván nyújtani a fizika különböző kutatási területeinek jelenlegi eredményeiről, problémáiról, további célkitűzéseiről. A lap „A klasszikus irodalomból” című rovatában rendszeresen közöl egy-egy téma köré csoportosított, immár klasszikussá vált cikkeket, amelyek a témakör befejezése, átlagosan 10–10 dolgozat megjelenése után a folyóiratfüzetekről leválasztva, az alsó lapszámozás szerint összekötve, önálló köteteket képeznek. A folyóiratból évenként egy kötet jelenik meg hat füzetben, füzetenként átlag 6 ív terjedelemben.

A kéziratok a következő címre küldendőek:

Jánossy Lajos akadémikus  
1121 Budapest XII., Konkoly Thege út  
Központi Fizikai Kutató Intézet

Ugyanerre a címre küldendő minden szerkesztőségi levelezés.

A közlésre el nem fogadott kéziratokat a szerkesztőség lehetőleg visszajuttatja a szerzőkhöz, de felelősséget a beküldött, el nem fogadott kéziratok megőrzéséért vagy továbbításáért nem vállal.

A folyóirat előfizetési ára kötetenként 48 Ft. Belföldi megrendelések az Akadémiai Kiadó, 1363 Budapest V., Alkotmány utca 21. (pénzforgalmi jelzőszámunk 215-11 488), külföldi megrendelések a „Kultúra” Könyv- és Hírlap Külkereskedelmi Vállalat, 1389 Budapest I., Fő utca 32. (pénzforgalmi jelzőszám: 218-10 990) útján eszközölhetők.

A kéziratokkal kapcsolatban a szerkesztőség a következőket kéri a szerzőktől:

1. A dolgozat elé rövid tartalmú ismertetőt írnak.
2. A levezetéseknek csak a gondolatmenetét és főbb lépéseit közölgék. Ha részletezésre lesz szükség, a szerkesztőség azt külön fogja kérni.
3. A kéziratokat gépelve, egy oldalra írva, 4 cm-es margóval, kettős sorközzel készítsék el.
4. Az ábrákat ceruzával, sima fehér papírra rajzolják. A nyomda számára a rajzok elkészítését a Kiadó vállalja.
5. Az ábrák alá rövid magyarázószöveget írnak.
6. A kéziratban az érvényben levő kiadói előírások szerint adjanak szedési útmutatásokat.
7. A szövegben az irodalmi utalásokat szögletes zárójelbe tegyék. Az irodalmi adatok megadásakor a folyóiratban kialakult formát használják.

# HOZZÁSZÓLÁS NAGY KÁROLY „VARIÁCIÓS ELVEK A FIZIKÁBAN” CÍMŰ CIKKÉHEZ\*

VINCZE GYULA

ATE, Fizika Tanszék, Gödöllő

Kimutatjuk egy egyszerű példa kapcsán, hogy a Gyarmati-elv Lagrange-sűrűségével konstruálható olyan variációs elv, mely nem kevésbé egzakt, mint a fizika más variációs elve.

## 1. Bevezetés

Igazolásul tekintsük a homogén és izotrop szilárd test hővezetésének példáját. A vizsgált test foglalja el az euklideszi tér egy egyszeresen összefüggő véges  $B$  tartományát, melynek  $\Gamma$  határa szakaszonként sima.

A rendszer anyagi egyenletei legyenek lineárisak és tegyük fel az egyszerűség kedvéért, hogy a fajhő egységnyi. Ekkor bármely  $t \in [0, \infty)$  idő és  $\mathbf{r} \in B$  térpontban teljesülnek a

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{J} = \sigma(\mathbf{r}, t), \quad (1.1a)$$

$$\mathbf{J} = -\lambda \nabla T \quad (1.1b)$$

egyenletek, ahol a  $\sigma$  forrás legyen előírt folytonos függvény és a  $\lambda$  pozitív skaláris hővezetési tényező legyen állandó.

A  $\Gamma$  határ egy diszjunkt  $\Gamma_1$  és  $\Gamma_2$  felosztásán adjuk meg a

$$\begin{aligned} T &= T^*(\mathbf{r}, t), \quad \forall (\mathbf{r}, t) \in \Gamma_1 \times [0, \infty); \\ J_n &= J_n^*(\mathbf{r}, t), \quad \forall (\mathbf{r}, t) \in \Gamma_2 \times [0, \infty) \end{aligned} \quad (1.2)$$

peremfeltételeket, ahol a  $T^*$  előírt hőmérséklet és  $J_n^*$  előírt normális hőáramsűrűség folytonos függvények.

Végül adjuk meg a kezdeti hőmérséklet eloszlását:

$$T(\mathbf{r}, 0) = f(\mathbf{r}), \quad \forall \mathbf{r} \in B. \quad (1.3)$$

A későbbiekben szükségünk lesz az alábbi tételre, melyet itt nem bizonyítunk.

1. Tétel. Az (1.1a) és (1.1b) hővezetési egyenletrendszernek az (1.2) perem- és (1.3) kezdeti feltételek mellett egy és csakis egy megoldása van.

Az egyértelműen létező megoldást  $(T_0, \mathbf{J}_0)$  módon fogjuk jelölni.

\* Érkezett 1976. VI. 24.



## 2. A variációs-elv megfogalmazása

Legyen  $V$  a  $B$  tartomány térfogata;  $\Omega_1$  és  $\Omega_2$   $\Gamma_1$  és  $\Gamma_2$  felülete;  $\Omega$  pedig a teljes határfelület.

Definiáljunk egy funkcionált:

$$I[T, \mathbf{J}] := \int_0^t \int_V \left\{ T \left[ \frac{\partial T}{\partial t} - \sigma(\mathbf{r}, t) \right] + \frac{\lambda}{2} (\nabla T)^2 + \frac{1}{2\lambda} \mathbf{J}^2 \right\} dV dt + \\ + \int_0^t \int_{\Omega_1} T^\times J_n d\Omega dt + \int_0^t \int_{\Omega_2} T J_n^\times d\Omega dt. \quad (2.1)$$

A fenti funkcionál  $\omega$  definíciós halmazát azon rendezett  $(T, \mathbf{J})$  párok alkotják, melyek eleget tesznek az (1.1a) egyenletnek, továbbá az (1.2) és (1.3) perem- ill. kezdeti feltételeknek, tehát

$$\omega := \left\{ (T, \mathbf{J}) \left| \frac{\partial T}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{J} = \sigma \wedge T \right|_{\Gamma_1} = T^\times \wedge J_n|_{\Gamma_2} = J_n^\times \wedge T|_{t=0} = f(\mathbf{r}) \right\}. \quad (2.2)$$

Látható, hogy  $\omega$  nem üres halmaz és hogy  $(T_0, \mathbf{J}_0) \in \omega$ . Most kimondjuk az extrémum elvet.

2. Tétel. Az  $\omega$  halmazon értelmezett  $I[T, \mathbf{J}]$  funkcionál azon  $(T, \mathbf{J}) \in \omega$  elemeken veszi fel minimumát, melyek az (1.1b) egyenletnek is eleget tesznek.

Bizonyítás: Vegyük észre, hogy az 1. tétel szerint egyetlen olyan  $(T, \mathbf{J}) \in \omega$  elem létezik, mely a 2. tétel megszorításainak eleget tesz, mégpedig a  $(T_0, \mathbf{J}_0) \in \omega$ .

Elegendő tehát azt belátni, hogy

$$\min_{(T, \mathbf{J}) \in \omega} I[T, \mathbf{J}] = I[T_0, \mathbf{J}_0]. \quad (2.3)$$

Állítsuk elő a  $(T, \mathbf{J}) \in \omega$  elemeket a

$$(T, \mathbf{J}) = (T_0 + \delta T, \mathbf{J}_0 + \delta \mathbf{J}) \quad (2.4)$$

alakban. Ekkor a  $\delta T$  hőmérséklet- és  $\delta \mathbf{J}$  hőáramsűrűség variációk eleget tesznek az alábbi feltételeknek:

$$\frac{\partial \delta T}{\partial t} = \delta \frac{\partial T}{\partial t} = -\nabla \cdot \delta \mathbf{J} = -\delta \cdot \nabla \mathbf{J}, \\ \delta T|_{\Gamma_1} = 0, \quad \delta J_n|_{\Gamma_2} = 0, \quad \delta T|_{t=0} = 0. \quad (2.5)$$

Képezzük az  $I[T, \mathbf{J}]$  funkcionál növekményét:

$$\Delta I := I[T_0 + \delta T, \mathbf{J}_0 + \delta \mathbf{J}] - I[T_0, \mathbf{J}_0] = \int_0^t \int_V \left\{ T_0 \frac{\partial \delta T}{\partial t} + \right. \\ + \delta T \left[ \frac{\partial T_0}{\partial t} - \sigma(\mathbf{r}, t) \right] + \delta T \frac{\partial \delta T}{\partial t} + \lambda \nabla T_0 \cdot \nabla \delta T + \frac{1}{\lambda} \mathbf{J}_0 \cdot \delta \mathbf{J} + \\ \left. + \frac{\lambda}{2} (\nabla \delta T)^2 + \frac{1}{2\lambda} (\delta \mathbf{J})^2 \right\} dV dt + \int_0^t \int_{\Omega_1} T^\times \delta J_n d\Omega dt + \int_0^t \int_{\Omega_2} \delta T J_n^\times d\Omega dt. \quad (2.6)$$

Vegyük most figyelembe (2.5) első egyenletéből következő

$$\int_V T_0 \frac{\partial \delta T}{\partial t} dV = - \int_{\Omega} T_0 \delta J_n d\Omega - \int_V (\nabla T_0) \cdot \delta \mathbf{J} dV$$

és a

$$\int_V \lambda \nabla T_0 \cdot \nabla \delta T dV = \int_{\Omega} \lambda (\nabla T_0)_n \delta T d\Omega - \int_V \lambda \Delta T_0 \delta T dV$$

átalakításokat. Ekkor (2.6)-ból rendezés után kapjuk, hogy

$$\begin{aligned} \Delta I = & \int_0^t \int_V \left[ \left( \frac{\partial T_0}{\partial t} - \lambda \Delta T_0 - \sigma \right) \delta T + \left( \nabla T_0 + \frac{1}{\lambda} \mathbf{J}_0 \right) \cdot \delta \mathbf{J} \right] dV dt + \\ & + \int_0^t \int_V \left[ \frac{\lambda}{2} (\nabla \delta T)^2 + \frac{1}{2\lambda} (\delta \mathbf{J})^2 \right] dV dt + \int_V \frac{1}{2} (\delta T)^2 dV \Big|_0^t - \\ & - \int_0^t \int_{\Omega_1} J_{0n} \delta T d\Omega dt - \int_0^t \int_{\Omega_2} T_0 \delta J_n d\Omega dt. \end{aligned}$$

Látható, hogy  $\Delta I$  lineáris része eltűnik, mivel a  $(T_0, \mathbf{J}_0) \in \omega$  teljesíti az (1.1b) egyenletet.

Hasonlóan eltűnnek (2.5) miatt a felületi integrálok is. A maradó kvadratikusan funkcionál pedig mindig pozitív, mivel  $\delta T|_{t=0} = 0$ . Tehát  $\Delta I > 0$ , amivel tételünk be van bizonyítva. Tekintettel arra, hogy  $\delta T$  és  $\delta \mathbf{J}$  nagyságára nem tettünk kikötést, így funkcionálunknak abszolút minimuma van. Megjegyzés: Eljárásunk általánosítható hőmérséklettől függő forrás esetére is. Ekkor az 1. tétel csak akkor teljesül, hogy  $\partial \sigma / \partial T \leq 0$ . A  $\partial \sigma / \partial T \leq 0$  feltétel egyben a minimumot is garantálja.

Megjegyzés: G. Jetschke (FSU Jena) és Hári (ATE Gödöllő) megmutatták, hogy  $\lambda = \lambda(T)$  esetén az  $I[T, \mathbf{J}]$  funkcionál stacionárius az egyértelmű megoldáson, de minimuma nincs. Ez a nehézség a  $\Gamma := \int \lambda(T) dT$  Kirchhoff-transzformációval történő ún. általános „ $\Gamma$ -kép” bevezetésével sem küszöbölhető ki.

Megjegyzés: A Gyarmati-elv Ann. Phys. 23, 353 (1969) szerinti alakja hővezetésre szorítkozva a (2.6) variációs-elv differenciál-elvének tekintendő. A kapcsolat a kétféle elv között analóg a Hamilton-elv és a Lagrange-elv kapcsolatához. Ebben a felfogásban a Gyarmati-elv a (2.1) funkcionál (idő szerint nem integrálva, de (2.2) fölött értelmezve!) stacionaritását állítja bármely rögzített  $t \in [0, \infty)$  időpillanatban, a  $(T_0, \mathbf{J}_0)(t) \in \omega$  elemen. Extrémum, mint arról könnyű meggyőződni, nincs, mivel a  $\int_V (\delta T \partial \delta T / \partial t) dV$  tag nem definit.

### 3. Variációs elvek nemfolytonos rendszerekre

Az 1. ábrán látható egyszerű elrendezést vizsgáljuk, melyre követeljük az alábbi feltételek teljesülését:

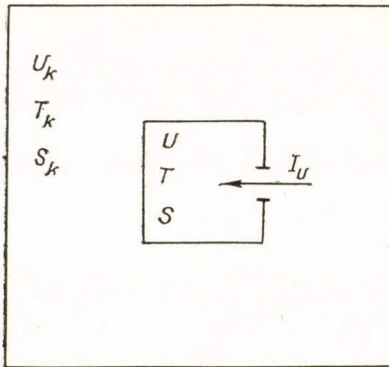
- i) Az  $U$  belső energiájú,  $T$  hőmérsékletű,  $S$  entrópiájú rendszer nagy kiterjedésű és emiatt közel állandó  $T_K$  hőmérsékletű hőtartályba merül;



- ii) A rendszerbeli inhomogenitások kiegyenlítődsére jellemző relaxációs idő alatt a rendszer belső energiacsereje, melyet az  $I_U$  belső energia áram közvetít, elhanyagolható;  
 iii) A hőtartály határán izolált.  
 Utolsó feltételünk alapján írhatjuk, hogy

$$\dot{U} := \frac{dU}{dt} = I_U; \quad \dot{U}_K = -I_U; \quad \dot{S} + \dot{S}_K \cong 0. \quad (3.1)$$

Az ii) feltétel miatt alkalmazható a Gibbs-reláció, melynek felhasználásával (3.1)-ből következnek a rendszer alapvető mérlegegyenletei:



$$\dot{U} = I_U, \quad (3.2)$$

$$\dot{S} - \frac{I_U}{T_K} = \left( \frac{1}{T} - \frac{1}{T_K} \right) I_U \cong 0. \quad (3.3)$$

A rendszer anyagi egyenletei legyenek lineárisak

$$U = KT, \quad (3.4)$$

$$I_U = L \left( \frac{1}{T} - \frac{1}{T_K} \right), \quad (3.5)$$

1. ábra

ahol a  $K$  hőkapacitás és (3.3) miatt az  $L$  hővezetési együttható pozitív. A következőkben a

rendszer kiegyenlítődségi folyamatát leíró egyenleteket vizsgáljuk hőmérséklet- és belső energia képbén.

#### a) Hőmérséklet kép

A számítások egyszerűsítésére tegyük fel, hogy a hőmérsékletek  $\Delta T = T - T_K$  különbsége elhanyagolható a  $T_K$  hőmérséklethez képest. Ekkor élhetünk egy egyszerű közelítéssel:

$$\left( \frac{1}{T} - \frac{1}{T_K} \right) I_U \cong -\frac{\Delta T}{T_K^2} I_U; \quad I_U = L \left( \frac{1}{T} - \frac{1}{T_K} \right) \cong -L \frac{\Delta T}{T_K^2}. \quad (3.6)$$

A fentiek alapján a hőmérséklet kiegyenlítődsét a (3.4), (3.5) és (3.6) egyenletekből következő

$$K\Delta\dot{T} = I_U; \quad I_U = -L \frac{\Delta T}{T_K^2} \quad (3.7)$$

egyenletrendszer írja le.

Ismeretes, hogy ennek az egyenletrendszernek előírt  $\Delta T|_{t=0} = \tau$  kezdeti feltétel mellett egyetlen  $(\Delta T_0, I_{U0})$  megoldása van. Most definiáljunk egy funkcionált az alábbi alakban

$$I[\Delta T, I_U] := \int_0^t \left[ \frac{\Delta T}{T_K^2} K\Delta\dot{T} + \frac{1}{2} L \left( \frac{\Delta T}{T_K^2} \right)^2 + \frac{1}{2L} I_U^2 \right] dt. \quad (3.8)$$

Legyen funkcionálunk értelmezési halmaza a következő:

$$\omega_T := \{(\Delta T, I_U) | K\Delta\dot{T} = I_U \wedge \Delta T|_{t=0} = \tau\}. \quad (3.9)$$

A 2. pontban mutatotthoz analóg módon igazolható, hogy a (3.8) funkcionál a (3.9) halmaz  $(\Delta T_0, U_{U0}) \in \omega_T$  elemén abszolút minimumot vesz fel.

b) *Belső energia kép*

Az iii) és ii) feltevéseink alapján írhatjuk, hogy

$$\frac{1}{T} - \frac{1}{T_K} = \frac{\partial S}{\partial U} - \frac{\partial S}{\partial U}\bigg|_e, \quad (3.10)$$

ahol az  $e$  index a kiegyenlítődési folyamat végén beálló egyensúlyi állapotra utal.

Ha a  $\Delta T$  hőmérséklet változáshoz tartozó  $\Delta U$  belső energiaváltozás kicsiny, akkor (3.10) még az alábbi alakban is felírható:

$$\frac{\partial S}{\partial U} - \frac{\partial S}{\partial U}\bigg|_e \simeq \frac{\partial^2 S}{\partial U^2}\bigg|_e \Delta U := -g\Delta U.$$

Itt mint ismeretes  $g > 0$ .

A belső energia kiegyenlítődési folyamatát ebben a képen tehát a

$$\Delta\dot{U} = I_U; \quad I_U = -gL\Delta U$$

egyenletrendszer írja le.

A fenti egyenletrendszernek előírt  $\Delta U|_{t=0} = f$  kezdeti feltétel mellett egyetlen  $(\Delta U_0, I_{U0})$  megoldása van. A (3.8) funkcionál belső energia képen nyilván az alábbi alakú lesz

$$I[\Delta U, I_U] := \int_0^t \left[ g\Delta U \Delta\dot{U} + \frac{1}{2} L(g\Delta U)^2 + \frac{1}{2L} I_U^2 \right] dt. \quad (3.11)$$

Definíciós halmaza pedig a következő

$$\omega_U := \{(\Delta U, I_U) | \Delta\dot{U} = I_U \wedge \Delta U|_{t=0} = f\}.$$

Extrémum elvünk most azt mondja ki, hogy a (3.11) funkcionál az  $\omega_U$  halmaz  $(\Delta U_0, I_{U0}) \in \omega_U$  elemén abszolút minimumot vesz fel.

Megjegyzés: Könnyű belátni, hogy a belső energia képen megfogalmazott extrémum elvünk ebben a konkrét modellben azonos az Onsager-féle legkisebb energiadiSSIPáció elvével.

Megjegyzés: A bemutatott minimum elvekből Friedrichs-transzformációval lehet konstruálni olyan funkcionálokat, melyek az egyértelmű megoldáson maximumot vesznek fel. Ekkor, mint azt könnyű megmutatni, a funkcionál definíciós halmazát azon értékpárok fogják képezni, melyek a minimum elvhez tartozó Euler–Lagrange-egyenletnek is eleget tesznek.





# A PULZÁLT NEUTRONFORRÁS SEGÍTSÉGÉVEL TÖRTÉNŐ REAKTIVITÁS MEGHATÁROZÁS NÉHÁNY MÓDSZERÉNEK VIZSGÁLATA\*

VALKÓ JÁNOS

MTA Központi Fizikai Kutató Intézete

## TARTALOMJEGYZÉK

1. BEVEZETÉS .....	200
2. A REAKTIVITÁS ÉS AZ IDŐFÜGGŐ REAKTOR PROBLÉMÁJA .....	202
2.1 A reaktivitás fogalma .....	202
2.2 Az időfüggő reaktor egyenlet és a statikus reaktivitás kapcsolata .....	204
2.3 Az időfüggő reaktor mérhető mennyiségei .....	206
2.4 Reaktivitásmérési módszerek .....	208
Az aszimptotikus periódus mérése .....	208
Neutronsokszorozás mérése .....	208
A prompt alapmódus bomlási állandójának meghatározása .....	209
A pontkinetika egyenleten alapuló módszerek: rúdejtés és inverz kinetikus módszer .....	210
Módosított pulzált módszerek .....	210
3. A PULZÁLT REAKTIVITÁSMÉRÉSI MÓDSZER FEJLŐDÉSE .....	211
4. ELMÉLETI EREDMÉNYEK .....	216
4.1 A terület-hányados módszer alapvető összefüggései .....	216
4.2 Az integrális módszer .....	218
4.3 A legkedvezőbb kezdeti eloszlás .....	221
4.4 A reflektor szerepe .....	225
4.5 A Gozani-módszer elmélete .....	226
5. NUMERIKUS VIZSGÁLATOK .....	230
5.1 Időfüggő számítások .....	230
5.2 Az időintegrálok közvetlen számítása .....	234
5.3 Két-csoport numerikus kísérletek .....	235
6. KÍSÉRLETI VIZSGÁLATOK .....	245
6.1 A berendezés leírása .....	245
ZR—4 reaktor .....	245
Neutrongenerátor és mérőberendezés .....	248
6.2 A mérések elvi és technikai problémái .....	249
A mérés útján meghatározható mennyiségek .....	249
A méréskiértékelő program használata .....	255
A detektorok reaktivitás perturbáló hatása .....	258
Mérési hiba, reprodukálás .....	260
6.3 Mérési eredmények .....	262
7. AZ EREDMÉNYEK DISZKUSSZIÓJA, KÖVETKEZTETÉSEK .....	265
Köszönetnyilvánítás .....	268
Irodalomjegyzék .....	268

\* Kandidátusi értekezés. Megvédve 1976. jún. 21. Érkezett 1976. szept. 17.



## 1. Bevezetés

Jelen dolgozat témája a pulzált neutronforrás segítségével történő reaktivitás meghatározás. Ilyen jellegű vizsgálatokat végeztünk a KFKI Reaktorfizikai Osztályán 1968 és 1974 között. A munka fő kísérleti bázisa a ZR—4 kritikus rendszer volt. Ez a reaktor kis zónájú, erősen reflektált rendszer, amelyben — mint ez a későbbiekben kitérünk — a szubkritikus reaktivitás megmérése különösen nehéz feladat. Néhány elemi próbálkozás után [1] a kezdeti, kísérletileg talált nehézségek hatására a szerző a probléma általánosabb keretek között történő numerikus vizsgálatát javasolta, az akkoriban első sikereit arató reaktorfizikai modell felhasználásával [2]. Ezzel párhuzamosan, elméleti eszközökkel a pulzált forrással történő reaktivitás meghatározás ismert módszereinek elvi alapjait kezdtük vizsgálni. Felismertük, hogy a mérések alapjául szolgáló összefüggések az általános transzportelmélet speciális közelítésein alapulnak. Emiatt elméletileg nem igen lehet eldönteni, hogy valóságos körülmények között melyik módszer ad várhatóan helyes eredményt és, hogy az egyes módszerek alkalmazhatóságát a rendszer milyen tulajdonságai, illetőleg a kísérlet elvégzésének milyen körülményei befolyásolják. Általánosan elfogadott nézet volt, hogy a Gozani-módszer [3] a korábban javasolt Sjöstrand-módszer [4] javított változata, ezért a különböző szerzők értetlenül álltak szemben azokkal a tapasztalatokkal, amelyek szerint számos konkrét esetben mégis az eredeti Sjöstrand-módszer bizonyult jobbnak [5].

A reaktivitás definíciójában fiktív, a valódi rendszertől különböző rendszer szerepel, emiatt a reaktivitás maga is fiktív, nem fizikai mennyiség, amelynek a megmérése nem történhet közvetlenül a definíciója alapján, hanem olyan közelítő összefüggések kellenek, amelyek összekapcsolják a mérhető mennyiségekkel. Az ilyen összefüggések levezetése és érvényességi körének megállapítása elméleti úton történhet, szükséges azonban ezeknek a kísérleti, esetleg numerikus igazolása. Munkánk során ezeknek a reaktivitásmérési módszereknek az eddigieknél általánosabb elméletét dolgoztuk ki. Megmutattuk, hogy az említett két módszer egymástól független, úgy hogy nem helyes az egyiket a másik javított változataként említeni. Rámutattunk arra, hogy a két módszer, alkalmazási körét nézve inkább egymás komplementeként tekinthető.

A Gozani-módszer eddig közölt levezetéseiben felismertünk egy konzekvensen elkövetett hibát. A helyes levezetés tárgyalásakor megmutattuk, hogy ez a módszer, bár sok fontos gyakorlati esetben jól használható, egy speciális közelítésen alapul, mélyebb fizikai gyökere nincsen, ezért alkalmazhatóságának feltételeit különösen fontos pontosan ismerni, ennek hiányában ugyanis az elkövetett hiba nagyságáról hamis illúzióink lehetnek.

A Sjöstrand-módszer teljesen új elméletét dolgoztuk ki, aminek során felismertük, hogy ez, egy általunk megadott általánosított formájában, fizikailag jól megalapozott, igen általános körülmények között alkalmazható módszer. Egyúttal körülhatároltuk azokat a feltételeket is, amelyek megszabják, hogy a módszer eredeti, egyszerűbb formájában mikor alkalmazható. Kitűnt, hogy éppen az erősen reflektált reaktorok esetében, amit először numerikus vizsgálatokkal, majd a ZR—4 rendszeren végzett kísérletsorozattal igazoltunk.

A numerikus kísérletek koncepciója meglehetősen újnak számított ebben a témakörben. Először időfüggő számításokat végeztünk, ahol egy önmagában is érdekes numerikus analízisbeli problémát is meg kellett oldani. A későbbiekben továbbfej-



lesztettük a felhasznált numerikus apparátust és közvetlenül számítottuk a mérési módszerben is szereplő alapvető mennyiségeket. Kidolgoztuk a pulzált forrás numerikus modellezését és bevezettük az effektív kezdeti neutroneloszlás fogalmát, amely igen sikeresnek bizonyult az elméleti és kísérleti eredmények összehasonlításában. Az elméleti eredményekből kiindulva szélsőséges kezdeti neutroneloszlásokat vizsgáltunk, amelyekről megmutattuk, hogy jól behatárolják a valóságos helyzetet, amelyet viszont az alkalmazott közelítésben egzaktul kiszámítani nem lehetne. Ezáltal útmutatást adtunk arra, hogyan lehet a szokásos közelítések keretein belül maradva olyan numerikus számításokat végezni, amelyek szisztematikusan mutatják, hogy az adott mérési módszer alkalmazható-e vagy sem. Továbbmenve, egy lényegében új mérési módszert javasoltunk azáltal, hogy a kísérleti eredmények interpretálásában megköveteljük ezeknek a számításoknak a figyelembevételét.

A ZR—4 reaktoron végzett kísérletekkel így kettős célt értünk el. Megmértük a reaktivitást a szóban forgó két módszerrel a reaktor különböző pontjaiban változó reflektáltság és forráshelyzet mellett. Az eredményeket a változtatott paraméterek függvényében tekintve olyan tendenciákat figyelhettünk meg, amelyek az elméleti és numerikus eredményekkel megegyeznek, ezáltal igazoltuk az új elméletet. Sikertült másrészt a reaktivitás helyes értékét megkapnunk a mérésekből azáltal, hogy a mért tendenciákat és a numerikus számításokból kapottakat összevetettük. A numerikus kísérletek lényegéhez tartozik, hogy nemcsak a méréseket tudtuk szimulálni, hanem az adott közelítésen belül egzaktul tudtuk számítani a mérendő mennyiséget (a statikus reaktivitást) is. A mérendő mennyiség és a mérési becslések relatív elhelyezkedésének törvényszerűségeit lehet felhasználni a valóságos kísérletek interpretációjában, ahol a mérési becslések rendelkezésre állnak, de a mérendő mennyiség természetesen nem ismert. Ezt a technikát mint új mérési módszert fogjuk fel, amellyel azóta további, gyakorlati eredményeket is elértünk.

A dolgozat 2. fejezetében először áttekintjük a reaktivitás fogalom alapvető tulajdonságait, az időben változó reaktor mérhető mennyiségeit és az őket összekötő elméleti összefüggéseket. Ezután különféle reaktivitásmérési módszerek rövid ismertetése következik, amit a pulzált módszer szerepének megértése szempontjából tartottunk szükségesnek. A 3. fejezet a pulzált módszer fejlődését mutatja be. Egyszerű történeti felsorolás helyett a mi vizsgálataink közvetlen előzményét jelentő, a Sjöstrand- és Gozani-módszerekkel kapcsolatos korábbi eredmények kritikai elemzését kíséreljük meg. Ezt szorosan kapcsoljuk ahhoz a gondolkodásmóddhoz, amellyel a reaktivitás fogalmát a 2. fejezetben bevezettük. Az az interpretáció, amely kiemeli a reaktivitás fiktív, matematikai jellegét, és ebből származtatja a reaktivitásmérés alapvető problémáit — végig ismert tényekre épül, összességében mégis új, először a szerző által leírt gondolatmenet.

Az új eredmények ismertetése a 4. fejezettel kezdődik, amelyben a reaktivitásmérési módszerek új elméletét tárgyaljuk. Az elméletileg talált eredmények numerikus vizsgálata az 5. fejezetben, a kísérleti igazolás pedig a 6. fejezetben van leírva. A tulajdonképpeni numerikus és kísérleti eredményeket az 5.3, illetve 6.3 pontok tartalmazzák. Az 5. és 6. fejezet többi pontjában a numerikus és kísérleti apparátusról és a numerikus és a kísérleti munka során megoldott rész-problémákról van szó. Ezeknek a bemutatását és a szöveg közben való elhelyezését a következők indokolják. Egyrészt, a szóban forgó apparátus kifejlesztésének jelentősége, amely túlnő az ebben a dolgozatban szereplő elméleti összefüggések igazolásán, mert — mint mondtunk — ez az apparátus a későbbiekben is használható új reaktivitásmérési módszer fontos



kelléke. Másrészt, kísérleti munka ismertetésénél általánosan elterjedt szokás, hogy a berendezés és a kísérleti technika leírása megelőzi az eredmények bemutatását. Úgy gondoltuk, hogy esetünkben leghelyesebb a numerikus apparátust ezzel analóg módon, a numerikus eredmények bemutatása előtt tárgyalni.

Az ismertetendő eredmények elérésében sokan segítettek. A dolgozat végén köszönetnyilvánítás formájában említem meg őket név szerint, azzal együtt, hogy a munka mely részében nyújtottak segítséget.

## 2. A reaktivitás és az időfüggő reaktor problémája

### 2.1. A reaktivitás fogalma

A reaktor időbeli viselkedésén a reaktor állapotát meghatározó  $\mathbf{N}$  állapotvektor időfüggését értjük, ami részletesebben a  $\Phi$  neutronfluxus és a  $c_i$  késő-neutron anyamag koncentrációk időfüggését jelenti. Az elméleti tárgyalás megkönnyítése céljából a továbbiakban egyetlen késő-neutron csoportot tekintünk, ezért az állapotvektor

$$\mathbf{N} = \begin{pmatrix} \Phi \\ c \end{pmatrix} \quad (2.1)$$

$\mathbf{N}$  változását az időfüggő transzportegyenlet [5] határozza meg, amely szimbolikusan így írható

$$\frac{\partial \mathbf{N}}{\partial t} = \hat{M}\mathbf{N} + \mathbf{S} \quad (2.2)$$

Az  $\hat{M}$  operátor a neutronok és késő-neutron anyamagok keletkezését és eltűnését írja le az alábbi módon.

$$\hat{M} = \begin{pmatrix} (1-\beta)f_p(v)v\hat{P} - v\hat{D}, & v\lambda f_d(v) \\ \beta\hat{P}, & -\lambda \end{pmatrix} \quad (2.3)$$

Itt  $f_p(v)$  és  $f_d(v)$  a keletkező prompt, illetőleg késő neutronok spektruma,  $\lambda$  a késő-neutron anyamagok bomlási állandója,  $\beta$  pedig a késő-neutron hányad.

A (2.3)-ban szereplő  $\hat{P}$  és  $\hat{D}$  operátorok a neutronkeltés, illetve eltüntetés operátorai.  $\hat{P}$  és  $\hat{D}$  konkrét alakja attól függ, milyen közelítésben írjuk fel a transzportegyenletet. A diffúziós közelítésben a két operátort így definiáljuk:

$$\hat{P}\Phi = \int_0^\infty v \Sigma_f(\mathbf{r}, v) \Phi(t, \mathbf{r}, v) dv \quad (2.4)$$

$$\hat{D}\Phi = -\text{div}(D \text{ grad } \Phi) + \Sigma(\mathbf{r}, v) \Phi - \int_0^\infty \Sigma_s(\mathbf{r}, v' \rightarrow v) \Phi(t, \mathbf{r}, v') dv' \quad (2.5)$$

Reaktorokban az öfenntartó láncreakció miatt általában olyan esetekkel állunk szemben, amikor nincs külső forrás,  $\mathbf{S}=0$ . Az ilyen körülmények között magára hagyott reaktor időbeli viselkedését kutatva gyakran elsősorban az érdekel bennün-

ket, vajon létrejön-e időtől független, stacionárius állapot, vagyis, hogy a reaktor kritikus-e. Azt keressük tehát, hogy mikor lesz

$$\frac{\partial N}{\partial t} = 0.$$

Ha (2.2)-ben  $\partial N/\partial t=0$ -t tételezünk fel, (2.1) és (2.3) felhasználásával olyan egyenletet írhatunk fel, amelyben csak a fluxus szerepel, a késő-neutron anyamagok sűrűsége nem.

$$[f_s(v)\hat{P}-\hat{D}]\psi = 0 \quad (2.6)$$

itt

$$f_s(v) = (1-\beta)f_p(v) + \beta f_d(v)$$

az ún. statikus spektrum.

A (2.6) egyenlet homogén, általában nincsen a triviálistól különböző megoldása, ami annak fel meg, hogy általában egy reaktor nem kritikus és ilyenkor (2.6) helyett az időfüggő (2.2) egyenlet írja le a lejátszódó folyamatokat. (2.2) megoldása helyett megtehetjük azt is, hogy a kérdést úgy tesszük fel, mennyire kell az adott reaktort megváltoztatnunk ahhoz, hogy éppen kritikus legyen. Az így kapott változtatást, amely nyilván annál nagyobb, minél távolabb volt az eredeti rendszer a kritikus állapottól, a kritikustól való távolság mérésére használhatjuk fel. Könnyen belátható, hogy ez matematikailag azt jelenti, hogy a (2.6) egyenlet helyett tekintjük, például, az

$$[f_s(v)\hat{P}-\hat{D}]\psi_\mu = \varrho_\mu f_s(v)\hat{P}\psi_\mu \quad (2.7)$$

sajátérték egyenletet [3]. ((2.7) helyett szokásos a

$$\left[\hat{D} - \frac{1}{k_\mu} f_s(v)\hat{P}\right]\psi_\mu = 0$$

alak is, ahol a sajátérték az  $1/k_\mu$  szorzó.  $\varrho_\mu = 1 - \frac{1}{k_\mu}$  helyettesítéssel a két egyenlet egymással ekvivalens.  $k_0$  a heurisztikus reaktorelméletből ismert sokszorozási tényező általánosítása.) A  $\varrho_\mu$  sajátértékeket úgy indexeljük, hogy az algebrailag legnagyobbat jelöljük  $\varrho_0$ -jal.  $\varrho_0$ -t nevezzük reaktivitásnak. (2.7) nem az egyedül lehetséges sajátértékegyenlet, amelyet a (2.2) időfüggő egyenlet helyett tekinthetünk, ha a rendszer állapotának a kritikus állapottól való távolságát kívánjuk kifejezni. Más lehetséges definícióktól való megkülönböztetés céljából (2.7)-et statikus sajátérték-egyenletnek,  $\varrho_0$ -t pedig statikus reaktivitásnak nevezik. A  $\varrho_0$ -hoz tartozó  $\psi_0$  sajátfüggvény végig nem-negatív. Ha  $\varrho_0=0$ , (2.7) átmegy (2.6)-ba, ilyenkor a reaktor eredeti állapotában kritikus. Ekkor  $\psi_0$  a reaktorban ténylegesen létező, időben nem változó neutronfluxus a hely és sebesség függvényében. Ha  $\varrho_0 \neq 0$  ez azt jelenti, hogy az eredeti reaktor nem kritikus, hanem éppen a produkciós tag

$$\varrho_0 f_s(v)\hat{P}\psi_0 \quad (2.8)$$

alakban szereplő megváltoztatásával tehető kritikussá. Ebben az esetben  $\varrho_0$  jól használható az eredeti reaktor állapotának jellemzésére. Látni kell azonban, hogy (2.8) szerepeltetésével az egyenlet nem az eredeti reaktorra, hanem egy fiktív, kritikus reaktorra vonatkozik.  $\psi_0$  az ebben a fiktív reaktorban létrejövő neutronfluxus. Ugyanígy a  $\varrho_0$  mennyiség olyan matematikai konstrukció, amely a valóságos reaktor



egyenletében nem szerepel. Éppen ezzel függ össze a reaktivitás meghatározásának problémája.

Előttünk áll egyfelől a nem kritikus reaktor, amelynek időbeli viselkedését (2.2) leírja, másfelől bevezettünk egy  $\varrho_0$  mennyiséget, a reaktivitást, amely jól jellemzi ugyan a rendszer állapotának a kritikustól való távolságát, de nem hozható közvetlen összefüggésbe a valódi reaktor mérhető mennyiségeivel.

## 2.2 Az időfüggő reaktor egyenlet és a statikus reaktivitás kapcsolata

Ha a reaktivitást mégis az adott szubkritikus reaktor időfüggő mennyiségeinek méréséből akarjuk meghatározni, akkor közelítő összefüggést kell találni a rendszer mérhető mennyiségei és a reaktivitás között. Az így kapható módszerek a reaktivitás meghatározásának kinetikus módszerei.

A (2.2) időfüggő egyenletet exponenciális kifejezésekkel próbáljuk kielégíteni

$$\begin{aligned} N &= N_i e^{\alpha_i t} \\ N_i &= \begin{pmatrix} \Phi_i \\ C_i \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (2.9)$$

(2.9)-et (2.2)-be helyettesítve kapjuk az

$$\hat{M}N_i = \alpha_i N_i \quad (2.10)$$

alakú kinetikus sajátértékegyenletet [3, 4], ahol az  $\alpha_i$  sajátértékek a (2.9)-cel definiált exponenciális módusok lehetséges időállandói. Általános esetben még nem sikerült bebizonyítani, hogy (2.10) megoldásai teljes rendszert alkotnak, de a transzportegyenlet gyakorlatban leginkább használt közelítéseiben (pl. többcsoport diffúziós közelítésben) ez teljesül. A reaktorkinetikában elfogadott, általánosan használt feltevés [6], hogy a rendszer bármely  $N$  állapotvektora kifejezhető (2.10) megoldásai szerint

$$N = \sum_i T_i e^{\alpha_i t} N_i \quad (2.11)$$

(2.3) felhasználásával (2.10), illetve (2.11) így írható

$$\left[ (1-\beta)f_p(v) + \frac{\lambda\beta f_d(v)}{\alpha_i + \lambda} \right] \hat{P}\Phi_i = \left( \hat{D} + \frac{\alpha_i}{v} \right) \Phi_i \quad (2.12)$$

$$C_i = \frac{\beta \hat{P}\Phi_i}{\alpha_i + \lambda} \quad (2.13)$$

$$\Phi(t, \mathbf{r}, v) = \sum_i T_i e^{\alpha_i t} \Phi_i(\mathbf{r}, v) \quad (2.14)$$

$$C(t, \mathbf{r}) = \beta \sum_i \frac{T_i}{\alpha_i + \lambda} e^{\alpha_i t} \hat{P}\Phi_i. \quad (2.15)$$

$\Phi_i$ -t kinetikus sajátfüggvénynek szokás nevezni. Adott, nem kritikus reaktorban  $\Phi_i$ ,  $\alpha_i$ ,  $T_i$  a rendszer megfigyelhető mennyiségei, minden reaktivitás mérési módszer valami olyan összefüggésre, kapcsolatra épül, amelyet ezen mennyiségek és

$\varrho_0$  között fel tudunk állítani. Látni fogjuk, hogy minden ilyen kapcsolat, a dolog természeténél fogva, vagy erősen közelítő jellegű, vagy csak elvi jelentőségű, amely gyakorlati mérésre alkalmatlan.

Ennek megvilágítása céljából tekintsük a (2.7) statikus sajátérték egyenlet adjungáltját [5, 7]

$$[f_s \hat{P} - \hat{D}]^+ \psi_i^+ = \varrho_i (f_s \hat{P})^+ \psi_i^+. \quad (2.16)$$

Valamely operátor adjungáltját a következő tulajdonsággal definiálhatjuk

$$(\varphi_1, \hat{A} \varphi_2) = (\hat{A}^+ \varphi_1, \varphi_2)$$

ahol a zárójel a megfelelő értelmezési tartományon vett skalárszorzatot jelenti. A  $\varphi_1$  függvényt, amelyre az  $\hat{A}^+$  adjungált operátor hat, adjungált függvénynek is nevezik, ennek kifejezésére a  $\varphi_1^+$  jelölést használhatjuk. Ha történetesen  $\varphi_1^+$  és  $\varphi_2$  a megfelelő operátorok sajátfüggvényei:

$$\hat{A}^+ \varphi_1^+ = \lambda \varphi_1^+$$

és

$$\hat{A} \varphi_2 = \mu \varphi_2,$$

akkor az adjungált operátor fenti definícióját használva kapjuk, hogy

$$(\lambda - \mu)(\varphi_1^+, \varphi_2) = 0.$$

Innen az látszik, hogy vagy  $\lambda \neq \mu$ , amikor is  $(\varphi_1^+, \varphi_2) = 0$ , tehát  $\hat{A}$  és  $\hat{A}^+$  különböző sajátértékekhez tartozó sajátfüggvényei egymásra ortogonálisak; vagy ha  $(\varphi_1^+, \varphi_2) \neq 0$ , akkor  $\lambda = \mu$ .

(2.7), illetve (2.16) megoldásairól ennek alapján meg lehet mutatni [5], hogy

$$(\psi_i^+, f_s \hat{P} \psi_j) = 0, \quad \text{ha} \quad \varrho_i \neq \varrho_j. \quad (2.17)$$

Ha ezután (2.16)-ot  $i=0$ -ra felírjuk, majd  $\Phi_i$ -vel szorozzuk; (2.12)-t pedig  $\psi_0^+$ -tel szorozzuk és felhasználjuk az adjungált operátor fenti definícióját, a következőt kapjuk. Egyfelől

$$\varrho_0 = \frac{(\psi_0^+, \hat{D} \Phi_i)}{(\psi_0^+, f_s \hat{P} \Phi_i)} + 1 \quad (2.18)$$

másfelől

$$\varrho_0 = \alpha_i \Lambda_i + \frac{\alpha_i \beta_{\text{eff}}^i}{\alpha_i + \lambda} \quad (2.19)$$

ahol

$$\Lambda_i = \frac{\left( \psi_0^+, \frac{1}{v} \Phi_i \right)}{(\psi_0^+, f_s \hat{P} \Phi_i)} \quad (2.20)$$

és

$$\beta_{\text{eff}}^i = \frac{(\psi_0^+, \beta f_a \hat{P} \Phi_i)}{(\psi_0^+, f_s \hat{P} \Phi_i)} \quad (2.21)$$



(2.18)-cal kapcsolatban a következőt kell megjegyezzük. Nyilvánvaló, hogy tetszőleges súlyfüggvény segítségével  $\varrho_0$ -t kifejezhetjük volna (2.7)-ből (vagy (2.16)-ból), az így kapható kifejezés azonban  $\varrho_0$ -ra mérési utasításként nem használható a benne szereplő  $\psi_0^+$  statikus, tehát a fiktív rendszerre vonatkozó függvény miatt, és nem utolsó sorban az integrálás miatt, ami azt jelenti, hogy  $\psi_0^+$ -et és  $\Phi_i$ -t ha mérésből akarnánk venni, akkor az egész rendszerre mindenhol meg kellene őket mérni. (2.18)-at, amely ugyanilyen jellegű kifejezés, csak a súlyfüggvény választása speciális, sem közvetlen mérési utasításként akarjuk felhasználni. A speciálisan választott súlyfüggvény jóvoltából megkaptuk a (2.19) összefüggést, amelyet „inhour” egyenletnek vagy reciprok-óra egyenletnek neveznek. A reciprok-óra egyenlet végre kapcsolatot teremt  $\varrho_0$  és a rendszer mérhető paraméterei, jelen esetben  $\alpha_i$  között. Szükség van azonban  $A_i$  és  $\beta_{\text{eff}}^i$  értékeire, vagyis az  $i$ -ik módushoz tartozó generációs időre, illetve effektív késő-neutron hányadra. ( $i=0$  esetén az indexet gyakran el szokták hagyni.)  $A_i$  és  $\beta_{\text{eff}}^i$ , (2.20) és (2.21) szerint szintén integrálok hánycsoportjai. A következő pontban látni fogunk olyan módszereket, amelyekkel (2.19) mégis felhasználható  $\varrho_0$  mérésére.

Mielőtt azonban vázlatosan áttekintenénk a reaktivitás mérés különböző módszereit, közelebbről meg kell ismerni az időfüggő reaktor mérhető mennyiségeit.

### 2.3 Az időfüggő reaktor mérhető mennyiségei

A (2.14) szerinti felbontásban a  $\Phi(t, \mathbf{r}, v)$  neutronfluxust exponenciális időfüggésű módusok összegeként állítottuk elő. Az alkalmazott egyszerű indexelés nem utal a sajátfüggvények bizonyos általános tulajdonságaira.  $\alpha_i$  lehetséges értékeit vizsgálva kitűnik [8], hogy a sajátértékek két csoportra oszthatók. Egyik csoportba tartoznak azok, amelyek abszolút értékekben jóval nagyobbak a késő-neutronok bomlási állandójánál, a másik csoportba pedig azok, amelyek abszolút értékekben a késő-neutronok bomlási állandóival összemérhető nagyságúak. Az első csoport tagjai a prompt bomlási állandók, a másik csoporté pedig a késő bomlási állandók. Jelölésükre az egyszerű  $i$  index helyett bevezetjük a csoport szerinti hovatartozást kifejező  $\mu(p)$  illetve  $\mu(d)$  indexeket.  $p$  utal a prompt állandókra,  $d$  a későkre. Ennek megfelelően (2.14) helyett a következőket írhatjuk

$$\Phi(t, \mathbf{r}, v) = \sum_{\mu(p)} T_{\mu(p)} e^{\alpha_{\mu(p)} t} \Phi_{\mu(p)}(\mathbf{r}, v) + \sum_{\mu(d)} T_{\mu(d)} e^{\alpha_{\mu(d)} t} \Phi_{\mu(d)}(\mathbf{r}, v). \quad (2.22)$$

A jobboldalon szereplő két összeget időnként az időfüggő neutronfluxus,  $\Phi(t, \mathbf{r}, v)$  prompt, illetve késő részeként említjük:

$$\Phi_p(t, \mathbf{r}, v) = \sum_{\mu(p)} T_{\mu(p)} e^{\alpha_{\mu(p)} t} \Phi_{\mu(p)}(\mathbf{r}, v) \quad (2.23)$$

$$\Phi_d(t, \mathbf{r}, v) = \sum_{\mu(d)} T_{\mu(d)} e^{\alpha_{\mu(d)} t} \Phi_{\mu(d)}(\mathbf{r}, v). \quad (2.24)$$

A (2.12) egyenletből látható, hogy a különböző  $\mu(p)$ , illetve  $\mu(d)$  indexekhez tartozó  $\Phi_{\mu}$ -k általában különbözők. Részletesebb vizsgálat alapján [5, 8] meg lehet mutatni, hogy a  $\Phi_{\mu}$  sajátfüggvények között mindig egy prompt és egy késő saját-



függvény erősen „hasonlít” egymásra. Nevezetesen található egy prompt és egy késő sajátfüggvény, amelyek végig nem-negatívak, ezeket prompt, illetve késő alapl módusnak nevezik és  $\Phi_{0(p)}(\mathbf{r}, v)$ , illetve  $\Phi_{0(d)}(\mathbf{r}, v)$ -vel jelölik. Ezekhez tartoznak — a csoportjukon belül — az algebrailag legnagyobb sajátértékek. A többi sajátfüggvény is (legalábbis a gyakorlatban használatos közelítésekben) egy-egy prompt és későbből álló párokba sorolható, és a hozzájuk tartozó sajátértékek algebrailag csökkenő sorrendjében ezek rendre mint  $\Phi_{1(p)}, \Phi_{1(d)}; \Phi_{2(p)}, \Phi_{2(d)}; \dots$  stb. indexelhetők.

(A 2. fejezet elején azt az egyszerűsítő feltevést tettük, hogy egyetlen késő-neutron csoport van. Ha általánosságban  $m$  késő-neutron csoportot tárgyalnánk, minden sajátfüggvény-csoportban egy prompt és  $m$  késő tag szerepelne, vagyis összesen  $m+1$ . Ezeket  $\mu(p)$  és  $\mu(d_1), \mu(d_2), \dots, \mu(d_m)$ -mel indexelnénk. A legegyszerűbb gyakorlati esetekben 6 késő csoport szerepel.)

Meg kell említeni, hogy a különböző indexekkel ellátott  $\Phi$ -k általános esetben mind különbözőek, de alacsonyabb rendű közelítésekben és/vagy egyszerű rendszerekben több különböző indexű függvény összeeshet. Így például ha csupasz, homogén reaktort tekintünk egysebesség diffúziós közelítésben, akkor

$$\Phi_{\mu(p)} = \Phi_{\mu(d)} = \psi_{\mu}. \quad (2.25)$$

A problémának ez a fajta degenerálódása bizonytalanságok kiindulópontja lehet elméleti összefüggések levezetésénél. Ha olyan közelítésben dolgozunk, ahol pl.  $\Phi_{\mu(p)} = \Phi_{\mu(d)}$ , nem tudhatjuk előre, hogy a levezetett összefüggés érvényes-e általános esetben, amikor ez az egyenlőség nem áll fenn.

Az  $\alpha$ -sajátértékekre visszatérve még a következőket kell megjegyezni. Szubkritikus reaktorban valamennyi  $\alpha$  negatív; szuperkritikusban a késő alapl módushoz tartozó  $\alpha$  pozitív. Minden esetben, elegendően hosszú idő után a legpozitívabb  $\alpha$ -nak megfelelő módus figyelhető meg, miután a többi módus hozzá képest elhanyagolhatóan kicsinyre lebomlott. Azt az  $\alpha$ -t  $\alpha_s$ -sel jelölhetjük, a reciprokát pedig  $T_s$ -el.

$$T_s = \frac{1}{\alpha_s} \quad (2.26)$$

az ún. stabil periódus. A reaktorban a neutronfluxus elegendően hosszú idő után  $e^{\alpha_s t}$  szerinti tiszta exponenciális időfüggést mutat. Ez egyébként  $\alpha_s > 0$  esetén (szuperkritikus reaktorban) igen jól megfigyelhető,  $\alpha_s < 0$  esetén sokkal kevésbé.

A reaktor időbeli viselkedésére általában az jellemző, hogy a neutronfluxus  $\Phi(t, \mathbf{r}, v)$  nem szeparálható csak időtől és csak a többi koordinátától függő két tényező szorzatára. Ha ezt mégis feltételezzük, egy gyakran használt közelítést, a pontreaktor közelítést vagy pont-modellt kapjuk. Míg a (2.19) reciprok-óra egyenletet általánosságban csak úgy használhatjuk, hogy (2.18), (2.20) és (2.21)-ben az  $\alpha_i$ -nek megfelelő  $\Phi_i$ -t szerepeltetjük, a pontreaktor közelítésben itt az állandósult alakfüggvényt használjuk és így a reciprok-óra egyenlet valóságos egyenletként használható a fluxus időfüggésében szereplő  $\alpha$ -k meghatározására. (2.19) általában  $m+1$ -ed fokú és így  $m+1$  gyöke van (jelen esetben az  $m=1$  feltevés miatt az egyenlet másodfokú és két gyöke van). Minthogy az állandósult alakfüggvény csak az alapl módus lehet, (2.19) megoldásával az alapl módus (prompt és késő) bomlási állandóit kapjuk meg,  $\alpha_{0(p)}$ -t és  $\alpha_{0(d)}$ -t.



## 2.4 Reaktivitás mérési módszerek

Teljességre való törekvés helyett csak néhány jellegzetes módszert említünk meg, amelyek valamilyen módon a pulzált módszer terén végzett munkánkhoz kapcsolódnak.

### *Az aszimptotikus periódus mérése*

A pont-reaktor közelítés az időfüggő reaktor problémáknak csak igen kis részét írja le helyesen. Ezek között viszont első helyen a (gyengén) szuperkritikus reaktor időbeli viselkedését. Szuperkritikus reaktivitás mérése éppen ezért a következőképpen történhet. Mérjük a rendszer stabil periódusát  $T_s$ -t.

$$\frac{1}{T_s} \equiv \alpha_s = \alpha_{0(d)}. \quad (2.27)$$

A paraméterek jellegzetes nagyságrendjét figyelembe véve látható, hogy (2.19)-ben az első tag többnyire elhanyagolható, így  $\alpha_{0(d)}$  méréseéből

$$\varrho_0 = \frac{\alpha_{0(d)}\beta}{\alpha_{0(d)} + \lambda} \quad (2.28)$$

ahol  $\beta$ -t (2.21)-ből az említett alakfüggvénnyel számítottuk ki. Ha a dollárban mért reaktivításra vagyunk kíváncsiak,

$$\$ \equiv \frac{\varrho_0}{\beta} = \frac{\alpha_{0(d)}}{\alpha_{0(d)} + \lambda}. \quad (2.29)$$

Szokás (2.19)-et használni oly módon, hogy a  $A$  és  $\beta$  paramétereket valahogy (pl. számítással) előre meghatározzák és a  $\varrho_0(T_s)$  függvényt táblázatosan szintén előre megadják.

### *Neutron sokszorozás mérése*

Szubkritikus reaktor reaktivitásának relatív mérésére alkalmas, egyszerű módszer, amely lényegében szintén a pont-modell alkalmazásán alapul. Leginkább reaktorok kritikussá tételekor alkalmazható, mert a módszer pontossága a kritikushoz közeledve rendkívül megjavul.

Szubkritikus reaktorban állandó forrást helyezünk el, amely  $S$  neutron emittál időegység alatt. Az időegység alatt detektálható neutronok száma nyilván

$$N \sim S + Sk + Sk^2 + \dots = S \cdot \frac{1}{1-k}, \quad k < 1 \quad (2.30)$$

$1/N$  pedig arányos  $\Delta k = 1 - k$ -val, ahol  $k$  az önfenntartó láncreakció egyszerű, heurisztikus elméletében szereplő sokszorozási tényező: az egymást követő neutron generációkban levő neutronok számának hányadosa. (Ennek általánosítása a (2.7)

tárgyalásánál szereplő  $k_0$  sajátérték.)  $1/N$  tart nullához, ha a reaktor a kritikus állapothoz közeledik. Ennek megfelelően  $1/N$  a reaktivitás relatív mértéke, aminek akkor van jelentősége, ha valamilyen mérhető paraméter változtatásával igyekszünk a reaktort kritikussá tenni, és ennek a paraméternek a függvényében  $1/N$ -et ábrázoljuk. A görbéből extrapolálhatunk a paraméter azon értékére, amelynél a reaktor kritikus lesz.

### *A prompt alapmódus bomlási állandójának meghatározása*

Ha a (2.19) reciprok-óra egyenletbe  $\alpha_{0(p)}$ -t helyettesítjük be  $|\alpha_{0(p)}| \gg \lambda$  miatt a

$$\varrho_0 = \alpha_{0(p)} \Lambda + \beta \quad (2.31)$$

összefüggést kapjuk, amely szintén alkalmas a reaktivitás meghatározására, feltéve, hogy valamilyen módszerrel  $\alpha_{0(p)}$ -t mérjük.  $\Lambda$ -t és  $\beta$ -t ismét vehetjük valamilyen számításból, de szokásosabb eljárás a következő. Ismét a dollárban mért reaktivitást,  $\varrho_0/\beta$ -t határozzuk meg,  $\Lambda$ -ról pedig feltételezzük, hogy a reaktor adott állapotában ugyanakkora, mint kritikus állapotban. A kritikus állapotban mért mennyiségeket  $c$  indexszel jelöljük,  $\alpha_{0(p)}$  helyett pedig egyszerűen  $\alpha$ -t írunk:

$$\alpha_c = \frac{\beta}{\Lambda} \quad (2.32)$$

ezt (2.31)-gyel összevetve kapjuk, hogy

$$\frac{\varrho_0}{\beta} = 1 - \frac{\alpha}{\alpha_c}. \quad (2.33)$$

Ennek a módszernek az a fő hibája, hogy a  $\Lambda$  állandóságára tett feltevés csak a kritikus állapot közvetlen közelében helytálló.

$\alpha_{0(p)}$  mérése többféleképpen történhet. Az egyik mindjárt a pulzált módszer. Ha a szubkritikus reaktorba neutronokat bocsátunk, a neutronok száma időben csökkenni fog. A csökkenés egy prompt folyamattal kezdődik, amelynek jellegzetes idő-állandója  $\alpha_{0(p)}$ . Ha a pulzált módszerrel csak  $\alpha_{0(p)}$ -t határozzuk meg, amit azután (2.33)-ban használunk  $\varrho_0/\beta$  kiszámítására, akkor Simmons és King [9] módszerét követjük.

$\alpha_{0(p)}$  meghatározható úgy is, hogy egyes neutron-láncok bomlását figyeljük meg. Természetesen megfelelő statisztika eléréséhez sok láncot kell megfigyelni, ezért ezek a mérések elég hosszú időt vesznek igénybe. Ilyen mérési módszerek a Rossi- $\alpha$  [10] és Feynman- $\alpha$  [11] mérések. Ezek részletesebb bemutatásától eltekintünk, mivel számunkra csak annak van jelentősége, hogy mint  $\alpha_{0(p)}$ -t szolgáltató módszerek, (2.33) révén, és a rá vonatkozó közelítések erejéig használhatók a reaktivitás meghatározására.



*A pontkinetikai egyenleten alapuló módszerek:  
rúd-ejtés és inverz kinetikus módszer*

Ha egy reaktorban a neutronok átlagos élettartama  $l$ , az  $N$  neutronszám időbeli megváltozását a következőképpen lehet felírni

$$\frac{dN}{dt} = \frac{k(1-\beta)-1}{l} N + \lambda C \quad (2.34)$$

$$\frac{dC}{dt} = \frac{Nk\beta}{l} - \lambda C. \quad (2.35)$$

Ezek az ún. pontkinetikai egyenletek. Ha a (2.19) inhour egyenlet levezetésénél a (2.12) kinetikus sajátérték helyett a (2.2) időfüggő egyenletet használjuk, megkaphatjuk a pontkinetikai egyenleteket és (2.18), (2.20) és (2.21)-hez hasonló definíciókat a szereplő paraméterekre. Lényeges különbség, hogy a paramétereket definiáló integrálokban az időfüggő  $\Phi(r, v, t)$  függvény szerepel, és ezért maguk a paraméterek is az idő függvényei. (2.34) és (2.35) használatának akkor van értelme, ha a paraméterek időfüggségét el lehet hanyagolni.

Bizonyos reaktivitás mérési módszerek, mint a stabil periódus mérése vagy a pulzált módszerek egy reaktorállapot reaktivitását mérik meg, függetlenül attól, hogy ezt az állapotot hogyan hoztuk létre. A rúdejtés módszere azt a reaktivitást méri meg, amennyire az eredetileg kritikus rendszer szubkritikussá válik a kérdéses abszorbens-rúd beejtésétől. Kritikus állapotból indulva, a  $k_0=1$ ,  $dN/dt=0$ ,  $dC/dt=0$  feltételek mellett (2.34) és (2.35) megoldható. A módszer lényege az, hogy a rúd leejtése után az eredeti  $N_0$  neutron szint hirtelen az  $N_1$  értékre esik, miközben a késő-neutron anyamag koncentráció  $C$  nem változik. (A prompt változást végtelen gyorsnak, a késő változást végtelen lassúnak tekintjük.) A rúd reaktivitás értékessége dollárban

$$\$_{\text{rúd}} = \frac{N_0}{N_1} - 1. \quad (2.36)$$

A pontkinetikai egyenletek elsősorban arra használhatók, hogy ismert reaktivitás (illetve a (2.34), (2.35) alakban  $k$ ) mellett a neutron szint időfüggése,  $N(t)$  meghatározható. Ez a probléma megfordítható:  $N(t)$  folyamatos méréséből  $\rho$  (illetve  $k$ ) kiszámítható. Erre analóg vagy digitális számológép (vagy ennek megfelelő cél-műszer) alkalmas, amely on-line összeköttetésben van valamilyen neutron detektorral, amely a kérdéses reaktorban van elhelyezve. Az egyenletben szereplő paramétereket a mérőberendezésben valamilyen módon be kell állítani. Az inverz kinetikus reaktivitásmérő a reaktivitás folyamatos monitorozására alkalmas, de a pontmodellre való támaszkodás miatt a pontossága a modell érvényességének függvénye.

*Módosított pulzált módszerek*

A pulzált forrással történő reaktivitás mérésnek azokat a módozatait, amelyekben a rendszer válaszából nemcsak  $\alpha_{0(p)}$ -t határozzuk meg, hanem a késő-neutron információt is felhasználva egyetlen mérésből (a kritikus állapot ismerete nélkül) tudjuk megadni a reaktivitást, módosított pulzált módszereknek is szokás nevezni.

Lényegében ugyanezeket a módszereket nevezzük terület-hányados módszereknek, mert a reaktivitást bizonyos időintegrálok (területek) hányadosaként állítják elő. A két legismertebb terület-hányados módszer a *Sjöstrand* [4] és *Gozani* [3] módszerek. Az ezekkel kapcsolatos elméleti és kísérleti vizsgálataink képezik jelen munka tárgyát, ezért velük a további fejezetekben részletesen fogunk foglalkozni.

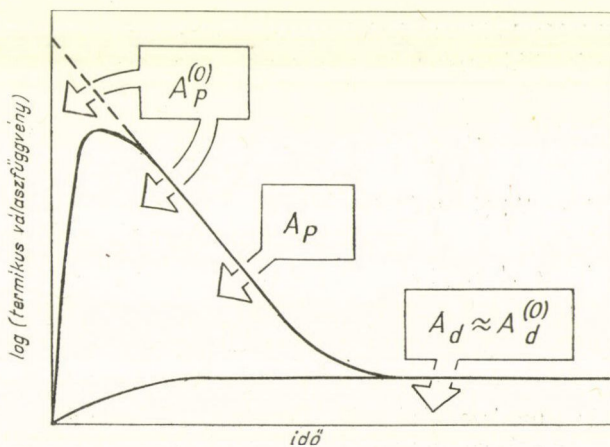
Általánosságban még annyit érdemes a reaktivitás mérésekről megjegyezni, hogy az abszolút egységekben megadott reaktivitást kísérletileg nem lehet meghatározni, minden módszer valamilyen relatív egységben adja [12]. Az  $1/N$  módszernél ez valamilyen önkényesen választott reaktorállapot reaktivitása, a dinamikus módszereknél pedig magától kínálkozik a reaktivitásnak  $\beta$  egységeiben való mérése, a dollárban kifejezett reaktivitás.

### 3. A pulzált reaktivásmérési módszer fejlődése

A pulzált neutronforrással történő szubkritikus reaktivitás mérő módszerek a mérés lebonyolítása szempontjából egymással lényegében azonosak, a különbség a kiértékelés módjában van. Ez összefügg azzal, hogy a vitatott és viszonylag nehezen eldönthető kérdés az, miként lehet a pulzált kísérlet mérhető mennyiségeit — elméleti úton talált összefüggés segítségével — kapcsolatba hozni a statikus reaktivitással.

Mint említettük, egyes módszerek csak a prompt alpmódus bomlási állandóját,  $\alpha_{0(p)}$ -t határozzák meg a mérésből [9], más módszerek a bomlászörbe késő részét is felhasználják [3, 4, 13]. Ez utóbbi módszereket módosított pulzált módszereknek is nevezik. Vizsgálatainkban kizárólag ezekkel a módszerekkel foglalkoztunk, ezek közül is csak a *Sjöstrand* és *Gozani* módszerekkel.

A különböző módszerek tárgyalásához célszerű bizonyos fogalmakat, illetve mennyiségeket definiálni. A szubkritikus reaktorba belőtt neutronimpulzus hatására a rendszerben a neutronfluxus a 3.1. ábra szerinti módon alakul. A  $\Phi(t, r, v)$  görbét ilyenkor a rendszer válaszfüggvényének nevezik. (Rövidség kedvéért, ahol ez megen-



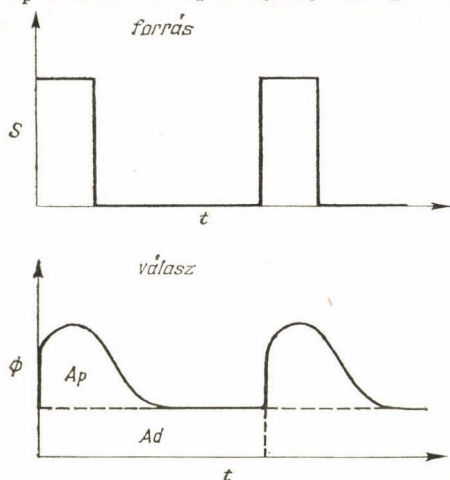
3.1 ábra. A pulzált válaszfüggvény jellegzetes mennyiségei



gedhető, gyakran nem fogjuk kiírni az  $r$  és  $v$  változókat.) A válaszfüggvény egy gyorsan változó és egy lassan változó részre bontható

$$\Phi(t) = \Phi_p(t) + \Phi_d(t). \quad (3.1)$$

Valamely detektor által detektált összes neutronok száma arányos  $A = \int \Phi(t) dt$ -vel, amit az integrálásra való tekintettel területnek, jelen esetben totál területnek szokás nevezni.  $\Phi_p(t)$  és  $\Phi_d(t)$  különböző időfüggése révén szétválasztható a detektált neutronok közül az  $\int \Phi_p dt$ -nek, illetve  $\int \Phi_d dt$ -nek megfelelő rész. Ezeket rendre  $A_p$ -val, illetve  $A_d$ -vel jelöljük, és prompt területnek, illetve késő területnek nevezzük.



3.2 ábra. A neutronimpulzus és a reaktor válaszáinak kvalitatív képe a Sjöstrand módszer tárgyalásához

$A$ ,  $A_p$  és  $A_d$  jelentése a 3.1 ábrán is látható.

A történetileg elsőként javasolt módszer, a Sjöstrand módszer [4] indoklása imponzánsan egyszerű heurisztikus gondolatmenet. Legyen a szubkritikus rendszer effektív sokszorozási tényezője  $k$ , és valamilyen külső forrásból bocsássunk a rendszerbe impulzusszerűen  $S$  számú neutron. A reaktorban elhelyezett neutron-detektor segítségével regisztrálhatjuk a rendszer válaszát, amely a prompt és késő neutron folyamatok miatt nyilván két részből fog állni: egy gyorsabb rész nagyjából követi a belőtt pulzus lefolyását, egy lassúbb rész pedig állandó hátteret hoz létre, ahogy ez a 3.2 ábrán kvalitatíve látható.

Az  $S$  forrásneutronból a következő generációban  $k \cdot S$  neutron lesz, majd  $k^2 \cdot S$ , és így tovább; ha azonban a prompt multiplikációt külön tekintjük, ez  $(1-\beta)k \cdot S$  az első generációban, majd  $[(1-\beta)k]^2 \cdot S$  a másodikban, és így tovább; aminek alapján nyilván

$$A \sim S + kS + k^2S + \dots = \frac{S}{1-k} \quad (3.2)$$

$$A_p \sim S + (1-\beta)kS + (1-\beta)^2k^2S + \dots = \frac{S}{1-k(1-\beta)} \quad (3.3)$$

figyelembe véve, hogy  $A = A_p + A_d$ . Rögtön látszik innen, hogy

$$\frac{A_p}{A_d} = \frac{1-k}{k\beta} = -\frac{\rho}{\beta}. \quad (3.4)$$

Sjöstrand már a módszer első publikálásakor [4] felhívta a figyelmet arra, hogy  $k$  valójában nem használható ilyen univerzálisan a neutrongenerációk népességének meghatározására, mert a reaktorban a neutronfluxus térfüggése is változik, és emiatt

egy adott pontban az egymást követő generációkhoz tartozó neutronok számának hányadosa nem feltétlen egyezik meg  $k$ -val. Érvelése szerint a (2.2) kinetikus egyenlet megoldásai közül egyedül az alpmódus képes időben úgy változni, hogy közben a térfüggés állandó marad, és így csak az alpmódusra igaz az előbbi gondolatmenet. Mivel a neutrondetektor jelében a reaktor pulzusválaszának magasabb harmonikusai is benne vannak, ezeket valami korrekcióval kellene kiszűrni.

A szerző véleménye szerint ez a megjegyzés károsan befolyásolta a pulzált reaktivitás mérés fejlődését. Ezt a módszert további története illusztrálja. Kevéssel ezután ugyanis Gozani [3] javasolt egy egyszerű kísérleti technikát, amellyel a magasabb harmonikusok kiszűrése megvalósítható. A 3.1 ábrán látható pulzusválaszt

$$N_0 e^{\alpha t} + B \quad (3.5)$$

alakú függvénnyel írja le, de a görbe első,  $0 < t < t_w$  időkhöz tartozó szakaszát kihagyja az illesztésből. A  $t_w$  várakozási időt úgy kell megválasztani, hogy ezalatt a magasabb rendű prompt harmonikusok annyira lecsökkenjenek (minden  $\alpha$  negatív), hogy a görbe további részét (a késő résztől eltekintve) egyetlen exponenciális függvény írja le, az alpmódusnak megfelelő időállandóval. Vagyis a (3.5) illesztésével kapott  $\alpha$  egyenlő  $\alpha_{(p)}$ -vel.

A válaszfüggvény (3.5) szerinti analitikus kifejezésének birtokában természetesen a megfelelő időintegrálok könnyen megkaphatók. A prompt területet, mivel ez most csak az alpmódus járulékát tartalmazza  $A_p^{(0)}$ -lal jelöljük.

$$A_p^{(0)} = \int_0^T N_0 e^{\alpha t} dt = -\frac{N_0}{\alpha} [1 - e^{\alpha T}] \quad (3.6)$$

$$A_d = BT, \quad (3.7)$$

ahol  $T=1/R$ , a neutron impulzusok ismétlődési ideje.

Az elméleti részben részletesen megmutatjuk, hogy ez a gondolatmenet hibás. Nem igaz az, hogy a magasabb harmonikusoktól ezzel az extrapolálásnak nevezett eljárással tökéletesen meg lehet szabadulni; de az sem igaz, hogy a harmonikusoktól mindenáron meg kell szabadulni. A Gozani-féle módszerről meg lehet mutatni, hogy egy meglehetősen szerény közelítésben, csupasz, homogén reaktorra alkalmazott egysebség diffúziós közelítésben a (3.6) és (3.7) definíciók mellett

$$\frac{A_p^{(0)}}{A_d} = -\frac{\varrho}{\beta} \quad (3.8)$$

egzaktul teljesül. Ez a tény és az, hogy reaktorok bizonyos körülmények között jól leírhatók már ebben az egyszerű közelítésben is — alkotják a Gozani-féle reaktivitásmérési módszer elvi alapját, nem pedig a Sjöstrand módszerhez való viszonya, amelytől — mint látni fogjuk a korrekt levezetés tárgyalásánál — teljesen független.

Más szavakkal arról van szó, hogy ezután mindenki, aki pulzált reaktivitás méréssel foglalkozott, úgy tekintette a magasabb harmonikusokat, mint amik nélkül a módszerrel semmi baj sem lenne. Még azután is tartotta magát ez az ellenséges



álláspont a pulzusválasz magasabb harmonikusaival szemben, amikor felfigyeltek arra, hogy a prompt alapmódus térbeli alakja nem egyezik meg a késő alapmódus térbeli alakjával [14]. Márpedig nyilvánvaló, hogy emiatt az alapmódusra sem igaz az eredeti Sjöstrand-féle gondolatmenet, és így még kevesebb az elméleti alap arra, hogy a Gozani által „javított” mérési módszert használják. Valójában az eredeti Sjöstrand-féle gondolatmenet a reaktorban levő egész neutronpopulációra érvényes valamilyen (súlyozott) integrális értelemben. Az ilyen irányba való általánosítást az elméleti eredményekről szóló 4. fejezetben tárgyaljuk. A prompt és késő sajátfüggvények térbeli alakja közötti eltérés, amit kinetikus torzulásnak neveznek, egyszerűbb közelítésben nem jelentkezik, de az egzakt (2.12) egyenletből  $\alpha_{i(p)}$  és  $\alpha_{i(d)}$  eltérő nagyságrendjét figyelembe véve rögtön következik.

Ugyanakkor, a (3.8) kapcsán említett okokból a Gozani módszert általában elég sikeresen alkalmazták. Amikor mégsem volt sikeres, ez elsősorban úgy jelentkezett, hogy a Gozani-reaktivitás a reaktor különböző pontjaiban különböző értékeket vett fel. Ezt a térfüggést az említett kinetikus torzulás okozza. Könnyen be lehet látni, hogy

$$A_p^{(0)}(\mathbf{r}) \sim \Phi_{0(p)}(\mathbf{r}), \quad (3.9)$$

illetve

$$A_d^{(0)}(\mathbf{r}) \sim \Phi_{0(d)}(\mathbf{r}), \quad (3.10)$$

amiért is

$$\frac{A_p^{(0)}}{A_d^{(0)}} \cdot \frac{\Phi_{0(d)}}{\Phi_{0(p)}} \quad (3.11)$$

mennyiség térfüggetlen lesz. Az elméleti eredményekről szóló fejezetben rámutatunk arra, hogy ez a térfüggetlen mennyiség azonban már nem szigorúan egyenlő a reaktivitással. Ennek ellenére, mint mondtuk, a módszert sokan, sikeresen alkalmazták [14, 15], kiszámítva a  $\Phi_{0(d)}/\Phi_{0(p)}$  normált fluxus-hányadost, és képezve a (3.11) alatti térfüggetlen reaktivitás becslést, amit korrigált Gozani módszernek is lehet nevezni.

Mások viszont kezdték észrevenni, hogy éppen olyankor, amikor a Gozani módszer nem ad jó eredményt, a Sjöstrand módszer gyakran közel térfüggetlen és hihető reaktivitás becslést ad [16, 17]. Számomra meglepő, hogy ennek ellenére nem adták fel azt az elképzelést, hogy a Gozani módszer a Sjöstrand módszer javított változata; nem ismerték fel, hogy a két módszer független egymástól, hanem kijelentették, hogy mindazokban az esetekben ahol a Sjöstrand módszer valóban igen jó volt, a magasabb harmonikusok zavaró hatását a kinetikus torzulás (egyébként ugyancsak zavaró) hatása véletlen folytán, szerencsésen kompenzálta [16]. Ez a magyarázat az évek során felhalmozódott előítéletek következménye, és ebben az értelemben állítottam korábban, hogy Sjöstrand megjegyzése a felharmonikusok szerepéről károsnak bizonyult.

A felmerült hiányosságok miatt egyesek úgy vélik [7], hogy a reaktivitás mérésben elkerülhetetlen valamilyen számolt mennyiség felhasználása. Ez azért kellemetlen, mert kísérleti és számolt eredmények összehasonlításában célszerű tisztán mérésből, illetőleg tisztán számításból eredő mennyiségekkel dolgozni. A Preskitt és mtsai [7] által javasolt módszer szerint a pulzált kísérletben  $\alpha_{0(p)}$  mérésére kell szorítkozni, de a  $A$  paraméter állandóságára tett korábbi feltevés helyett  $A$ -t részletes több-



csoport számítással kell meghatározni. [7]-ben ezenkívül értékes levezetéseket találunk, amelyek közelebb hozzák a Gozani módszert és általában a területhányados módszerek lényegét.

Garelis és Russell [13] javasolt egy további módszert, amely a szerző véleménye szerint szintén a felharmonikusok szerepének félreértésén alapul. Corngold [18] megmutatta, hogy a Garelis—Russell módszer egzaktul érvényes csupasz homogén rendszerben, egycsoport diffúziós közelítésben. Az ebből levont következtetések azonban általános esetben nem igazolódnak. Az ún. „bracketing” módszer [19], amely szerint a Gozani és Garelis—Russell reaktivitások közrefogják a reaktivitás valódi értékét, egyáltalán nem vált be [7].

Minthogy a Gozani módszer hibáját a kinetikus torzulás okozza, logikusnak látszik az a próbálkozás, amely ennek hatását próbálja direkt módon csökkenteni. Elvi megfontolásokból arra lehet következtetni, hogy a kinetikus torzulás mértéke nagyobb neutronenergiáknál (a magasabb csoportokban) kisebb. A (2.12)-ben szereplő  $\alpha/v$  tag  $v$  növekedésével csökken. Ezért Aizawa [20] gyorsneutronokra érzékeny detektorral mért Gozani módszerrel. Ezt úgy érte el, hogy a detektort kadmiummal borította. Módszerét Hecker és mtsai [21] fejlesztették tovább: különböző detektor árnyékoló anyagokat próbáltak ki. A Sjöstrand módszer alkalmazhatóságát demonstráló munkánk [22] nyomán megpróbálták az árnyékolt detektorokat a Sjöstrand módszerben is, és itt ez még sikeresebbnek mutatkozott, de ennek az elméleti háttere még egyáltalában nem tisztázott.

A pont-reaktor modell egyszerű továbbfejlesztése az ún. két-pont modell [23, 24], amely reflektált reaktorok tárgyalására alkalmas. Ennek felhasználásával Waltar és Ruby [25, 26] új módszert vezetett le a pulzált reaktivitás mérés kiértékelésére, amely azonban nem más, mint a Sjöstrand módszer két-pont modellbeli megfelelője. (Az összes prompt harmonikus összege helyett az alapmódus plusz egy felharmonikus összege szerepel, több ugyanis a két-pont modellben nem létezik.) A módszert reflektált reaktorban használták, rendkívül sikeresen. A Waltar—Ruby reaktivitások a Gozani reaktivitásoknál sokkal térfüggetlenebbek, és a számításokkal is elég jól megegyeznek. Mogilner és mtsai [27] is vizsgálták ezt a módszert, és hasonló eredményeket kaptak. Egyikük sem figyelt fel ugyanakkor arra, hogy a két-pont modellen alapuló módszerükkel lényegében a Sjöstrand módszert használják.

Masters és Cady [16], jóllehet eredményeik a Sjöstrand módszer alkalmazhatóságát igazolják, kijelentik, hogy ez teljesen véletlen. Nem hiszenek a Sjöstrand módszerben, nem kísérlik meg körülhatárolni, hogy mikor, milyen feltételek mellett alkalmazható, hanem az egészet úgy tekintik, hogy bizonyos esetekben több hibaforrás — nevezetesen a felharmonikusok és a kinetikus torzulás — hatása véletlen folytán kompenzálja egymást. Ebben látják a Sjöstrand módszer általuk is talált alkalmazhatóságának egyetlen magyarázatát. Ezt az érvelést veszi át Bell és Glasstone reaktorfizikai kézikönyve is [5].

A fentiekkel ellentétben Vandeplas [28] kifejezetten síkraszáll a Sjöstrand módszer mellett, sőt javasolja az integrális módszerek használatát. Tőle származnak az egyszerű integrálás és súlyozott integrálás módszere elnevezések. Munkája rendkívül intuitív, de elméleti levezetései az állításait egyáltalában nem igazolják. Mérési eredményeit viszont a mi későbbi numerikus számításaink kvalitatíve igen jól reprodukálják. Dragt [29] viszont a közelmúltban két jelenségkör kapcsán részletesen elemzi a magasabb harmonikusok alapvető szerepét, ami végül is szintén a Sjöstrand módszer, illetve integrális változatainak elméleti igazolását segíti elő.



Becker és Quisenberry, Vandeplas, Waltar és Ruby és saját korábbi mérési eredményeinkre támaszkodva; elsősorban *Preskitt és mtsai*, valamint *Masters és Cady* világos elméleti megállapításait követve kezdtük kidolgozni a terület-hányados módszerek pontos elméletét. Első cikkünkben [22] a Sjöstrand módszer elméletének leglényegesebb alapelveit fejtettük ki, de ekkor még egy sor kérdést nem láttunk világosan. Ezekre későbbi cikkeinkben térünk vissza. Sikeresen alkalmaztuk viszont a numerikus kísérletezést. Utaltunk a Gozani módszer egy jellegzetes hibájára, de ennek pontos magyarázatát csak később adtuk meg [30]. Ugyancsak utaltunk az integrális módszerek várhatóan előnyös tulajdonságaira, ennek részletes kifejtését azonban [31] tartalmazza. A kétszóport numerikus kísérletek mellett munkánkban végig felhasználtunk egycsoport analitikus eredményeket és ezek numerikus kiértékelését [32].

A pulzált kísérlet numerikus szimulálásában elért eredményeinket követve *Parks* [33] azt javasolja, hogy ne is mérjük a reaktivitást csak  $\alpha_{0(p)}$ -t, számítsuk is ki ugyanezt a teljes szokásos reaktorfizikai számítási modell segítségével, majd valamilyen alkalmasan választott illesztő paraméter segítségével módosítsuk a számítást úgy, hogy a mért és számított  $\alpha_{0(p)}$  megegyezzen. Ezután egyszerűen számítsuk ki  $\varrho_0$ -t az előzőkkel konzisztens statikus számítási modell alapján.

Úgy érezzük, hogy ez a módszer mégsem helyettesítheti az egyéb reaktivitás mérési módszereket. A bonyolult reaktor zónák számítása igen nehéz, jogos feltevés ugyanakkor, hogy pontosan azok a komplikáló tényezők (mint a szabályozó rudak elhelyezkedésének háromdimenziós struktúrája vagy a teljesen irreguláris anyagi összetétel), amelyeknek fontos szerepük van abban, hogy a reaktivitás éppen annyi, amennyi — nem érintik lényegesen valamely mérési módszer alkalmazhatóságát. Ezt, éppen ellenkezőleg, a rendszer általános jellemzői (mint átlagos dúsítás és moderáltság foka, zóna mérete vagy a reflektáltság) határozzák meg. Éppen ezért, a rendszer pontos számítása helyett erősen közelítő modellezés elegendő, ezzel már numerikusan tanulmányozhatjuk az egyes módszerek jellegzetes viselkedését és a valódi reaktivitáshoz való viszonyát. Valamely mérési, illetőleg kiértékelési módszert ezután ennek fényében eredményesen használhatunk. Munkánk eredménye a Sjöstrand és Gozani módszerek elméletének új megfogalmazásán és ennek kísérleti igazolásán kívül éppen ez az új módszernek is tekinthető eljárás: használjuk szinte bármelyik módszert (lehetőleg persze, azt, amelyik eleve, elméleti megfontolások alapján a legjobbnak tűnik) de előzőleg ismerkedjünk meg azzal, hogy hogyan viselkedik az adott rendszerben és kísérleti elrendezés mellett — a mérés numerikus szimulálása segítségével. Hogy ez pontosan hogyan értendő, erre a további fejezetek adnak választ.

#### 4. Elméleti eredmények

##### 4.1 A terület-hányados módszer alapvető összefüggései

Az alábbiakban rátérünk a pulzált forrással történő reaktivitás mérés — eredetileg *Sjöstrandtól* [4] származó — terület-hányados módszerének részletes tárgyalására. A gyakorlatban a pulzált reaktivitás mérést  $R$  frekvenciával ismétlődő pulzással végzik, ahol rendszerint megkövetelik az

$$|\alpha_0| \gg R \gg \lambda \quad (4.1)$$

feltétel teljesülését. Itt  $\alpha_0$  jelenti a prompt alapmódus bomlási állandóját,  $\lambda$  pedig a már bevezetett késő-neutron bomlási állandó. (4.1) teljesülése esetén a pulzusválasz prompt része két forrás pulzus között teljesen lebonyolódik, a válasz késő része azonban ilyen rövid idő alatt nem változik lényegesen, ezért konstansnak tekinthető. Ennek a kiértékelés technikai lebonyolítása szempontjából van jelentősége, ugyanakkor elméleti vizsgálatokban lényegesen egyszerűbb és áttekinthetőbb egyetlen belőtt neutronimpulzus sorsát tárgyalni. A kétféle eljárás ekvivalenciájára már régen rámutattak [34], mi a teljesség kedvéért a 6.2 pontban az állítás igazolását is megadjuk.

Tekintsünk tehát egy szubkritikus reaktort, amelybe a  $t=0$  időpillanatban az

$$S = S(\mathbf{r}, v) \delta(t) \quad (4.2)$$

neutronimpulzust bocsátjuk. (Késő-neutron anyagokat — értelemszerűen — nem lövünk a rendszerbe.) (4.2) időfüggése miatt ez (2.10) illetőleg (2.12)–(2.15) megoldását teszi szükségessé a következő kezdeti érték mellett:

$$\frac{1}{v} \Phi(t=0, \mathbf{r}, v) = S(\mathbf{r}, v). \quad (4.3)$$

A (4.2)-höz fűzött megjegyzés értelmében a pulzus belövéséig késő-neutron anyag nem volt a rendszerben, tehát

$$C(0, \mathbf{r}) = 0. \quad (4.4)$$

Ezt (2.15)-tel összevetve a következő összefüggést kapjuk

$$\sum_i \frac{T_i}{\alpha_i + \lambda} \hat{P} \Phi_i = 0. \quad (4.5)$$

A (4.5) formulát „összeg-szabály”-nak neveztük el, mert a pulzus választ alkotó különböző módusok bizonyos összegére vonatkozó általános érvényű összefüggés, amely alapvető jelentőségű a terület-hányados módszerek levezetésében.

Mielőtt ebben az irányban továbbmennénk, foglaljuk össze az itt szereplő mennyiségek — részben már a 2., 3. fejezetben érintett — tulajdonságait. A kinetikus sajátérték probléma (2.10) megoldásai a sajátértékek abszolút értékének nagysága szerint élesen szétválnak a prompt, illetőleg késő módusokra [5, 8]. Ennek megfelelően a  $\Phi$  kinetikus fluxus szétválasztható prompt és késő részére (lásd (2.23) és (2.24) egyenleteket)

$$\Phi(t, \mathbf{r}, v) = \Phi_p(t, \mathbf{r}, v) + \Phi_d(t, \mathbf{r}, v) \quad (4.6)$$

(2.14) alapján pedig

$$\Phi_p(t, \mathbf{r}, v) = \sum_{\mu(p)} T_{\mu(p)} e^{\alpha_{\mu(p)} t} \Phi_{\mu(p)}(\mathbf{r}, v) \quad (4.7)$$

$$\Phi_d(t, \mathbf{r}, v) = \sum_{\mu(d)} T_{\mu(d)} e^{\alpha_{\mu(d)} t} \Phi_{\mu(d)}(\mathbf{r}, v). \quad (4.8)$$



A terület-hányados módszerben szereplő időintegrálok pedig a következőképpen írhatók

$$A_p(\mathbf{r}, v) \equiv \int_0^\infty \Phi_p(t, \mathbf{r}, v) dt = - \sum_{\mu(p)} \frac{T_{\mu(p)}}{\alpha_{\mu(p)}} \Phi_{\mu(p)}(\mathbf{r}, v) \quad (4.9)$$

$$A_d(\mathbf{r}, v) \equiv \int_0^\infty \Phi_d(t, \mathbf{r}, v) dt = - \sum_{\mu(d)} \frac{T_{\mu(d)}}{\alpha_{\mu(d)}} \Phi_{\mu(d)}(\mathbf{r}, v). \quad (4.10)$$

Az összeg-szabály (4.5) kifejezésében is elvégezve a prompt-késő szétválasztást kapjuk, hogy

$$- \sum_{\mu(p)} \frac{T_{\mu(p)}}{\alpha_{\mu(p)} + \lambda} \hat{P} \Phi_{\mu(p)} = \sum_{\mu(d)} \frac{T_{\mu(d)}}{\alpha_{\mu(d)} + \lambda} \hat{P} \Phi_{\mu(d)}. \quad (4.11)$$

Itt a baloldalon valamennyi  $|\alpha_{\mu(p)}| \gg \lambda$ , ezért  $\lambda$  elhanyagolásával ide  $-\hat{P}A_p$  írható:

$$\hat{P}A_p = \sum_{\mu(d)} \frac{T_{\mu(d)}}{\alpha_{\mu(d)} + \lambda} \hat{P} \Phi_{\mu(d)}. \quad (4.12)$$

Mindkét oldalt  $\hat{P}A_d$ -vel osztva

$$\frac{\hat{P}A_p}{\hat{P}A_d} = - \frac{\sum_{\mu(d)} \frac{T_{\mu(d)}}{\alpha_{\mu(d)} + \lambda} \hat{P} \Phi_{\mu(d)}}{\sum_{\mu(d)} \frac{T_{\mu(d)}}{\alpha_{\mu(d)}} \hat{P} \Phi_{\mu(d)}}. \quad (4.13)$$

A most kapott összefüggés a terület-hányados módszerek elméletének lényeges állomása. Látható, hogy a baloldalon a Sjöstrand-féle mérési utasításhoz (3.5) hasonló kifejezés áll; meg fogjuk mutatni, hogy a jobboldal pedig bizonyos feltételek mellett lényegében megadja a reaktivitást. Különböző irányokban indulhatunk el, ezeket egymásután a következő pontokban tárgyaljuk. Kiindulásul minden esetben (4.13) szolgál.

#### 4.2 Az integrális módszer

Az alábbiakban levezetünk egy igen általános körülmények között érvényes módszert, amely Sjöstrand eredeti, heurisztikus gondolatmenetének közvetlen általánosítása a térfüggő reaktorkinetika keretei között.

(2.12) és (2.7) részletes összehasonlításából kitűnik, hogy megfelelő indexelés mellett minden  $\psi_\mu$  statikus sajátfüggvényhez találhatunk olyan  $\Phi_{\mu(d)}$  késő kinetikus sajátfüggvényt, hogy [7]

$$\psi_\mu \approx \Phi_{\mu(d)}. \quad (4.14)$$

Ennek felhasználásával, megtartva a  $\mu(d)$  index jelölést (4.13)-ból kapjuk, hogy

$$\frac{\hat{P}A_p}{\hat{P}A_d} = - \frac{\sum_{\mu(d)} \frac{T_{\mu(d)}}{\alpha_{\mu(d)} + \lambda} \hat{P}\psi_{\mu(d)}}{\sum_{\mu(d)} \frac{T_{\mu(d)}}{\alpha_{\mu(d)}} \hat{P}\psi_{\mu(d)}}. \quad (4.15)$$

Ha most a számlálóban és nevezőben is beszorzunk  $\psi_0^+ f_s(v)$ -vel, majd integrálunk, a (2.17) ortogonalitási reláció felhasználásával a következőt kapjuk

$$\frac{(\psi_0^+ f_s, \hat{P}A_p)}{(\psi_0^+ f_s, \hat{P}A_d)} = - \frac{\alpha_{0(d)}}{\alpha_{0(d)} + \lambda} \approx - \frac{\varrho}{\beta_{\text{eff}}} \quad (4.16)$$

$\alpha_{0(d)}/(\alpha_{0(d)} + \lambda)$ -nak  $\varrho/\beta_{\text{eff}}$ -vel való azonosítása a (2.19) inhour egyenlet egyenes következménye; a  $\approx$  jelet azért használjuk, mert  $\alpha_{0(d)}/\lambda$  elhanyagolása szükséges. (4.16) bal oldala a *súlyozott integrálás módszerének* [28, 31] mérési utasítása. Valamelyik skalárszorzatot explicite felírva látjuk, hogy

$$(\psi_0^+ f_s, \hat{P}A_p) = \int_0^\infty \int_0^\infty \int_{V_c} \psi_0^+(\mathbf{r}, v) f_s(v) v \Sigma_f(\mathbf{r}, v') A_p(\mathbf{r}, v') dv' dv d\mathbf{r} \quad (4.17)$$

a  $v$  szerinti integrálás külön elvégezhető:

$$\int_0^\infty \psi_0^+(\mathbf{r}, v) f_s(v) dv = \psi_f^+(\mathbf{r}). \quad (4.18)$$

A  $\psi_f^+(\mathbf{r})$  jelöléssel azt érzékeltetjük, hogy az alkalmazandó súlyfüggvény a gyors csoport(ok) adjungált függvénye.  $\psi_f^+(\mathbf{r})$  számítással határozható meg.

A súlyozott integrálás módszere,

$$(\$_{\text{SJ}})_{\text{WI}} = \frac{(\psi_f^+, \hat{P}A_p)}{(\psi_f^+, \hat{P}A_d)} = - \frac{\varrho}{\beta} \quad (4.19)$$

kétségkívül elvileg alkalmas a szubkritikus reaktivitás meghatározására. (4.19) bal oldalán a  $\hat{P}$  operátor jelenléte szavakban azt jelenti, hogy a méréshez hasadási detektort kell használni, ami közvetlenül  $\hat{P}\Phi$ -t szolgáltatja.  $\hat{P}A$ -t ebből  $t$  szerinti integrálással kapjuk. A reaktor aktív zónájának minden pontjában kell mérni; a  $\psi_f^+$  súlyfüggvényt pedig megfelelő számológépi programmal kiszámítani. Ez a mérés, noha meglehetősen bonyolult, igényesebb célokra, például referenciaként, elvégezhető. A levezetett súlyozott integrális módszer jelentősége azonban szerintünk nem ebben van. Sokkal inkább abban, hogy segítségével rá lehet mutatni az eredeti Sjöstrand-féle mérési eljárás mélyebb fizikai alapjaira, és ezáltal egy olyan tulajdonságát lehet bebizonyítani, amely a gyakorlatban jól felhasználható: ha az eredeti Sjöstrand módszer a reaktor aktív zónájában végig térfüggetlen reaktivitás-bebecslést ad, vagyis  $\$_{\text{SJ}}(\mathbf{r}) = \text{const.}$ , akkor  $\$_{\text{SJ}} = -\beta$ , ha pedig megadható  $\$_{\text{SJ}}(\mathbf{r})$  minimális és maximális értéke, vagyis a zónán belüli térfüggésének alsó és felső korlátai, akkor a valódi reaktivitás biztosan e két korlát között helyezkedik el.



Ezeknek az állításoknak a vizsgálatára tekintsünk termikus reaktort. Itt a hasadások legnagyobb része termikus energiájú neutronok hatására jön létre, ezért általában megengedhető az

$$\int_0^{\infty} v \Sigma_f(\mathbf{r}, v) A(\mathbf{r}, v) dv \approx v \Sigma_f(\mathbf{r}, v_{th}) A(\mathbf{r}, v_{th}) \quad (4.20)$$

közelítés.  $v_{th}$  a termikus neutronok átlagos sebességét jelenti. (4.19) helyett termikus reaktorban tehát

$$\frac{\int_{V_c} \psi_f^+(\mathbf{r}) v \Sigma_f(\mathbf{r}, v_{th}) A_p(\mathbf{r}, v_{th}) d\mathbf{r}}{\int_{V_c} \psi_f^+(\mathbf{r}) v \Sigma_f(\mathbf{r}, v_{th}) A_d(\mathbf{r}, v_{th}) d\mathbf{r}} = -\$ \quad (4.21)$$

írható. Az eredeti Sjöstrand-féle reaktivitás mérés képlete

$$\$_{SJ}(\mathbf{r}) = \frac{A_p(\mathbf{r}, v_{th})}{A_d(\mathbf{r}, v_{th})}. \quad (4.22)$$

Ezt (4.21)-be beírva kapjuk, hogy

$$\frac{\int_{V_c} \Psi_f^+(\mathbf{r}) v \Sigma_f(\mathbf{r}, v_{th}) \$_{SJ}(\mathbf{r}) A_d(\mathbf{r}, v_{th}) d\mathbf{r}}{\int_{V_c} \psi_f^+(\mathbf{r}) v \Sigma_f(\mathbf{r}, v_{th}) A_d(\mathbf{r}, v_{th}) d\mathbf{r}} = -\$, \quad (4.23)$$

ahonnt pedig következik, hogy

$$\$_{SJ}^{MIN} \leq -\$ \leq \$_{SJ}^{MAX}. \quad (4.24)$$

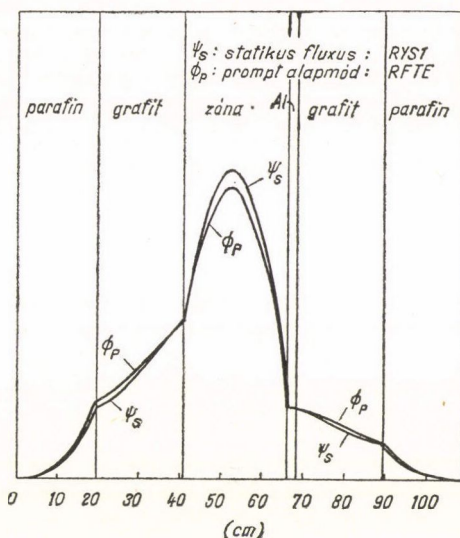
Ezt az egyenlőtlenséget a Sjöstrand módszer „behatárolási” tulajdonságának neveztük el. Rögtön megjegyezzük, hogy pl. a Gozani módszerről, amelynek hibája szintén legfeltűnőbb a szeszélyes térfüggés formájában jelenik meg, hasonló tulajdonság nem mondható ki; meg lehet mutatni, hogy ha  $\$_{G0}(\mathbf{r}) = \text{const.}$ , ez még nem feltétlen jelenti, hogy egyszersmind  $\$_{G0} = -\$$ .

A súlyozott integrálási módszer még egy érdekes vonatkozását említjük. Erősen reflektált reaktorokban (4.21)-ben a  $\psi_f^+(\mathbf{r})$  súlyfüggvény változása figyelmen kívül hagyható és (4.21) helyett sikeresen alkalmazható az ún. egyszerű integrálás módszere [28, 31]:

$$(\$_{SJ})_{PI} = \frac{\int_{V_c} v \Sigma_f(\mathbf{r}, v_{th}) A_p(\mathbf{r}, v_{th}) d\mathbf{r}}{\int_{V_c} v \Sigma_f(\mathbf{r}, v_{th}) A_d(\mathbf{r}, v_{th}) d\mathbf{r}} \approx -\frac{\rho}{\beta}, \quad (4.25)$$

ahol  $\psi_f^+(\mathbf{r})$  helyett 1 áll. Ennek magyarázata abban rejlik, hogy míg csupasz rendszerben  $\psi_f^+(\mathbf{r})$  valamilyen, a rendszer belsejében felvett maximális értékről  $\sim 0$ -ra csökken az integrálási tartomány szélén, addig erősen reflektált reaktor aktív zónájában  $\psi_f^+(\mathbf{r})$  alig változik, a zóna-reflektor határon az értéke még egész közel lehet a zóna belsejében felvett maximumához.

Az ebben a pontban foglalt állításokat részletes numerikus vizsgálatok igazolják. A numerikus eredményekről szóló fejezetben mégsem fogunk beszámolni ezekről, mert ezekben a vizsgálatokban a szerző csak korlátozott mértékben vett részt. Itt egészen röviden összefoglaljuk az eredményeket. A numerikus vizsgálatokban szerepelt 3 rendszer: egy erősen reflektált, nagy dúsítású reaktor (A), egy gyengén reflektált, kis dúsítású reaktor (C) és egy átmeneti rendszer (B). Két különböző reaktivitás mellett ( $\sim 15\%$  és  $\sim 30\%$ ) két szélsőséges forrás-alak hatását is vizsgálták. (A kezdeti eloszlás kérdését 1. a 4.3 pontban.) Az elméleti eredményekből kitűnik, hogy a Sjöstrand módszer valamenyny változata számára a reflektáltság növelése és a zónában koncentrált kezdeti eloszlás kedvező. Itt a két csoport diffúziós numerikus eredmények szerint a súlyozott integrálási módszer még a legkedvezőtlenebb esetben is 1%-nál kisebb hibával megadta a statikus reaktivitást. Az egyszerű integrálás az erősen reflektált reaktorban éppen olyan jó eredményt adott, mint a súlyozott integrálás, de a gyengén reflektált C rendszerben a statikusan 30,9%-nak talált reaktivásra 38,1%-t adott reflektor pulzus esetén. Zóna pulzus esetén ez 31,3%-ra javult.



4.1 ábra. Kinetikus torzulás a ZR—4-ben.  
Egy dimenzióban számított  $\Phi_{0(p)}$  és  $\psi_0$ .

### 4.3 A legkedvezőbb kezdeti eloszlás

Ismét visszatérünk (4.13)-hoz, hogy egy teljesen más úton induljunk el. Az előző pontban a sajátfüggvények között fennálló ortogonalitási reláció felhasználásával egzaktul eltávolítottuk a jobboldalon álló összegben a magasabb rendű módusokat. Ezáltal természetesen a baloldal, a mérési utasítás, meglehetősen bonyolult lett. Ebben és a következő pontban azt fogjuk vizsgálni, milyen feltételek teljesülése esetén lehet a magasabb rendű módusokat egyszerűen elhanyagolni.

Mint a 3. fejezetben láttuk, viszonylag gyakran találkozunk olyan esetekkel, ahol ez megengedhető, vagyis ahol az eredeti Sjöstrand módszer jó eredményeket ad, de ezt más kutatók mindeddig különböző, önmagukban a módszer alkalmazása ellen szóló zavaró hatások véletlenszerű, szerencsés kompenzálásának tekintették. A következőkben részletesen megmutatjuk, hogy ez nem így van, és hogy milyen törvényszerűségek érvényesek. Kétségtelen, hogy miután az előző pontban a súlyozott integrálási módszer levezetésével megmutattuk, hogy a Sjöstrand-féle mérési eljárásnak milyen fizikai háttere van, legjobban az érdekel bennünket, hogy az eredeti elhanyagolások, illetve közelítések tekintetében ez milyen kapcsolatban áll az egzakt, általánosított módszerrel, legfőképpen pedig, hogy milyen körülmények között alkalmazható a reaktivitás kielégítő pontosságú meghatározására.



A  $\mu(d)$  módus index növekedésével  $T_{\mu(d)}$  rohamosan csökken, más szóval  $\Phi_d$  kifejezésében az alpmódus dominál. Általánosan elfogadott [14] és általunk is numerikusan ellenőrzött (l. 5.1 pont) az a gyakorlat, hogy  $A_d$  és  $A_d^{(0)}$  között egyenlőséget tételezünk fel, ahol a (0) index arra utal, hogy  $A_d^{(0)}$ -ban csak az alapharmónikust vettük figyelembe. Ennek alapján (4.13) így írható

$$\frac{\hat{P}A_p}{\hat{P}A_d} = - \frac{\sum_{\mu(d)} \frac{T_{\mu(d)}}{\alpha_{\mu(d)} + \lambda} \hat{P}\Phi_{\mu(d)}}{\frac{T_{0(d)}}{\alpha_{0(d)}} \hat{P}\Phi_{0(d)}} \quad (4.26)$$

A  $T_{\mu(d)}$  amplitúdók részletesebb vizsgálatához kifejezzük őket a kinetikus sajátértékegyenletek (2.12)–(2.15), valamint ezek adjungáltja, illetve (4.3) felhasználásával [5, 6]

$$T_i = \frac{(\Phi_i^+, S)}{\left(\Phi_i^+, \frac{1}{v} \Phi_i\right)} \cdot \frac{1}{1 + \frac{\beta\lambda}{(\alpha_i + \lambda)^2} \cdot \frac{(f_d \Phi_i^+, \hat{P}\Phi_i)}{\left(\Phi_i^+, \frac{1}{v} \Phi_i\right)}} \quad (4.27)$$

A (2.12)–(2.15)-nek megfelelően az általános  $i$  indexet használtuk a sajátfüggvények jelölésében.  $\Phi_i^+$  a  $\Phi_i$ -nek megfelelő adjungált sajátfüggvény. Amint ez egyébként nyilvánvaló, (4.27)-ből is látszik, hogy a fluxus sajátfüggvények szerinti kifejtésében szereplő  $T_i$  amplitúdók nagyságát a forrás, vagy (4.3) szerint a kezdeti neutron eloszlás határozza meg. (4.27) vizsgálata alapján meg lehet választani a kezdeti neutron eloszlást úgy, hogy  $\mu(d) \neq 0$  esetén minden  $T_{\mu(d)} = 0$  legyen. Ehhez a (4.14) közelítő összefüggésre van szükség; pontosabban a (4.14)-gyel analóg

$$\Phi_{\mu(d)}^+ \approx \psi_{\mu(d)}^+ \quad (4.28)$$

közelítő egyenlőség alapján  $\Phi_{\mu(d)}^+$  helyett a megfelelően indexelt statikus adjungált sajátfüggvényt írjuk be (4.27)-be. Meg kell jegyezni, hogy (4.28) (akárcsak (4.14)) olyan közelítésben érvényes, ahol  $f_p = f_d = f_s = f$ . Nyilvánvaló, hogy pl. a kétsoport közelítés termikus reaktorok esetében ilyen. A (2.17) ortogonalitási relációt is felhasználva kapjuk, hogy az

$$S(\mathbf{r}, v) = (\text{const.}) f(v) \hat{P}\psi_0. \quad (4.29)$$

által meghatározott kezdeti neutron eloszlás esetén a (4.27)-ből kapott együtthatók közül

$$\begin{aligned} T_{0(d)} &\neq 0 \\ T_{\mu(d)} &= 0, \quad \text{ha} \quad \mu(d) \neq 0. \end{aligned}$$

Természetesen valamennyi  $T_{\mu(p)} \neq 0$ . Mindenesetre, (4.13)-ban ebben a speciális esetben, jobboldalon a számlálóban csak a  $0(d)$  indexű tag szerepel, vagyis

$$\frac{\hat{P}A_p}{\hat{P}A_d} = - \frac{\alpha_{0(d)}}{\alpha_{0(d)} + \lambda} = - \frac{\rho}{\beta}. \quad (4.30)$$

A (4.29) alatti kezdeti neutron eloszlást a „legkedvezőbb forrás alaknak” neveztük el, mert ilyen forrás mellett az eredeti Sjöstrand módszer igen általános feltételek között érvényes. A levezetés, amelyben erről meggyőződünk, nem igazolja az állítást a reflektorban elhelyezett detektorok esetére a (4.5) összeg szabálytól kezdve végig mindenütt szereplő  $\hat{P}$  operátor miatt, ami a reflektorban zérus. Meg lehet mutatni, hogy a legkedvezőbb kezdeti eloszlás mellett termikus reaktorban  $A_p/A_d$  a reflektorban is megadja a reaktivitást, éppúgy, mint a zónában [35].

A kapott eredményhez néhány megjegyzést lehet fűzni. Waltar és Ruby [25] két-pont modellen alapuló levezetésük során megmutatják, hogy ha a kezdeti neutron-eloszlás olyan, hogy

$$\begin{aligned} N_C(t=0) &\neq 0, \\ N_R(t=0) &= 0, \end{aligned} \quad (4.31)$$

akkor az általuk ajánlott reaktivitás (ami a Sjöstrand módszer két-pont modellbeli megfelelője) helyes értéket ad a zónában és a reflektorban is. ((4.31)-ben  $N_C$  és  $N_R$  a zónában, illetve a reflektorban levő neutronok számát jelölik. Ezek a két-pont modell jellegzetes mennyiségei.)

Ami a kezdeti neutron eloszlást vagy forrás alakot illeti, erről külön kell szólni. Könnyű észrevenni, hogy ez az elnevezés bonyolult, csak fenomenológikusan definiálható fogalmat takar. Nyilvánvaló ugyanis, hogy a pulzált kísérletekben használt neutron források szinte kivétel nélkül 14 MeV-es, lényegében monoenergetikus és a reaktor méreteihez képest pontszerű források. Ráadásul rendszerint a reaktoron kívül helyezkednek el. Ilyen forrás tárgyalása diffúziós közelítésben természetesen lehetetlen. Annak sincs értelme, hogy a forrás eloszlást pl. a reaktor kinetikus sajátfüggvényei szerint fejtsük sorba, amit implicite az eddigi tárgyalás során pedig megtettünk. Éppen ezért kezdeti eloszláson nem a tényleges forrás-neutronok eloszlását értjük. A forrás-neutronok térbeli és energia szerinti eloszlása a forrás elhagyása után nagyon rövid idő alatt erősen változik: a neutronok eljutnak a reaktor legkülönbözőbb pontjaiba, és az energiájuk is általában nulla és az eredeti 14 MeV között a legkülönbözőbb értékeket veheti fel. A forrás-neutronoknak ez a térbeli és energiabeli szétterülése olyan rövid idő alatt megy végbe, ami a pulzált kísérlet időskáláján még nem számottevő. Ezért ezen rövid időn belül bármelyik pillanathoz tartozó neutroneloszlást tekinthetjük a forrás alakjának, vagyis a kezdeti eloszlásnak. Noha ezek jelentősen különböznek egymástól, ebből a szempontból ekvivalensek.

Feltevésünk szerint

- elegendően rövid idő alatt kialakul egy olyan eloszlás, amely már eléggé szétterült ahhoz, hogy a továbbiakban diffúziós közelítést lehessen alkalmazni;
- ez az eloszlás az energia függvényében olyan, hogy a neutronok nagy része a reaktor-spektrum gyors tartományába esik (két-csoport esetén a gyors csoportba), a hasadási energiák felett és a termikus csoportban ehhez képest kevés neutron van;
- az eloszlás térbeli alakját részben a tényleges forrás (gyorsító target) helye, részben a reaktor anyagi-geometria felépítése szabja meg.

Az így kialakult eloszlást tekintjük kezdeti eloszlásnak, és ez az amelyik ha a (4.29) feltételt kielégíti, akkor a Sjöstrand reaktivitás végig az egész reaktorban és mindkét csoportban egyenlő a statikus reaktivitással. Az ily módon definiált elosz-



lást effektív kezdeti neutroneloszlásnak is nevezzük. Ezt az eloszlást kell használni azokban a két-csoport diffúziós számításokban, amelyekkel a pulzált reaktivitás-mérést numerikusan szimuláljuk.

Hogyan határozzuk meg az effektív kezdeti eloszlást adott reaktor és target helyzet mellett? Ahhoz, hogy ennek pontosan eleget tegyünk, rendkívül bonyolult transzport- vagy Monte-Carlo számításokra lenne szükség. Enélkül is azonban, sok mindent megtudhatunk az effektív kezdeti eloszlásról néhány kísérleti tapasztalat és eddigi elméleti ismereteink birtokában.

*Waltar és Ruby* [26] a neutrongenerátort a zóna közepétől a reflektor belsejébe vitte, miközben a kapott reaktivitás értékek alig változtak. Ez azt jelenti, hogy az effektív kezdeti eloszlás nem követte szigorúan a generátor helyének változását, hanem lényegében ugyanaz maradt, mint volt. Részben ezt értjük azon, hogy az effektív kezdeti eloszlást bizonyos mértékig a reaktor jellemzői határozzák meg.

*Masters és Cady* [16], *Kosály és Valkó* [22] numerikus eredményei még a legkedvezőbb kezdeti eloszlás létezésének felismerése előtt arról tanúskodnak, hogy a zónában és a gyors csoportban koncentrált forrás eloszlás hihetetlenül kedvező a Sjöstrand módszer számára. [22]-ben a következő két szélsőségesen idealizált forrás eloszlást vizsgáltuk:

— a „zóna-pulzust”, amely

$$S(C) = \begin{cases} \text{const.} & \text{a zónában} \\ 0 & \text{a reflektorban} \end{cases} \quad (4.32)$$

— illetve a „reflektor-pulzust”, amely

$$S(R) = \begin{cases} 0 & \text{a zónában} \\ \text{const.} & \text{a reflektorban.} \end{cases} \quad (4.33)$$

Mindkét esetben csak a gyors csoportban volt forrás, a termikusban nem. Az  $S(C)$  forrás rendkívüli sikerét azonnal magyarázza a legkedvezőbb forrás eloszláshoz való erős hasonlósága: a zónában jelentős, a reflektorban zérus, a gyors csoportban jelentős, a termikusban zérus.

A numerikus eredmények és valódi kísérletek összevetésekor a 6., 7. fejezetben látni fogjuk, hogy a (4.32), (4.33) szélsőséges kezdeti eloszlások és általában az effektív kezdeti eloszlás fogalma igen jól használható.

Ígéretünkkel némiképpen ellentétben ebben a pontban nem elhanyagoltuk a (4.13) számlálójában levő összegben a magasabb rendű módusokat, hanem olyan forrás alakot találtunk, amely mellett ezek egyáltalában nem lépnek fel. Látni kell azonban, hogy a legkedvezőbb kezdeti eloszlás kísérletileg aligha megvalósítható, ezért a probléma úgy néz ki, hogy adott kezdeti eloszlás elegendően „hasonlít”-e a legkedvezőbbnek talált eloszláshoz, hogy az említett magasabb módusok amplitúdói elhanyagolhatóan kicsik legyenek. Ilyenformán mégis csak ennek az elhanyagolásnak a feltételeit vizsgáltuk, további részletekre pedig a numerikus és kísérleti eredmények diszkussziójában térünk vissza.



#### 4.4 A reflektor szerepe

Könnyen be lehet látni, hogy míg a magasabb rendű harmonikusok minden további nélkül elhagyhatók a (4.13) nevezőjében levő összegben, ez nem tehető meg teljes általánosságban a számlálóban. Itt ugyanis az egyébként  $\mu(d)$  növekedésével általában erősen csökkenő  $T_{\mu(d)}$  amplitúdók a szintén rohamosan csökkenő  $\alpha_{\mu(d)} + \lambda$  mennyiséggel vannak elosztva. Az előző pontban láttuk, hogy a neutronok kezdeti eloszlásának meghatározó szerepe van abban, hogy a számlálóban levő összeg magasabb tagjai elhagyhatók-e vagy sem. Az alábbiakban arról lesz szó, hogy ezek a magasabb harmonikusok annál inkább elhanyagolhatók, minél reflektáltabb reaktorról van szó.

Ki lehet mondani teljes általánosságban, hogy a Sjöstrand módszer alkalmazhatóságának matematikai feltétele az, hogy ezek a harmonikusok elhanyagolhatók legyenek, vagyis hogy (4.13) számlálójában az alap-módus domináljon. Ez a megállapítás azért érdekes, mert itt késő módosukról van szó. Azt már láttuk, hogy bizonyos esetekben a rendszer jól leírható a csupasz homogén termikus reaktor modellel, amikor is a Gozani módszer érvényes. Ha ezenkívül a rendszer kisméretű, nem túl mélyen szubkritikus, a magasabb *prompt* harmonikusok csak elhanyagolható amplitúdóval fognak jelentkezni, és így a Sjöstrand módszer is jól alkalmazható, mint a Gozani módszer közelítése:

$$S_{SJ} \approx S_{GO} \quad (4.34)$$

Egész munkánk során, természetesen, minket nem ez az eset érdekel elsősorban. A (4.13)-ban döntő szerepet játszanak a késő módusok, aminek alapján nyilvánvaló, hogy itt a Gozani módszertől függetlenül levezetett Sjöstrand módszer érvényességi körét, feltételeit vizsgáljuk. Azt láttuk, hogy a kinetikus torzulás miatt a helyzet igen bonyolult. Szemléletesen úgy foghatjuk fel, hogy a forrás neutronok a *prompt* módusokat gerjesztik, ezek pedig a késő módusokat. Minthogy az egymásnak megfelelő *prompt* és késő módusok egymástól különböznek, bármelyik *prompt* módusnak véges vetülete van valamennyi késő módusra, vagyis bármelyik *prompt* módus általában az összes késő módust gerjeszti. Mindezt a (4.13) kapcsán talált matematikai feltétel közvetlenül és teljes általánosságban még nem használható fel arra, hogy a Sjöstrand módszer érvényességének kézzel fogható fizikai-technikai feltételeit megadjuk.

Ha teljes általánosságban nem tudjuk is ezt megtenni, közelebb hozhatjuk a megoldást a probléma egy-csoport diffúziós közelítésben való vizsgálatával. Ez ugyan nem lehet bizonyító erejű a közelítés túlzott egyszerűsége folytán, de azért jó tájékozódást nyújt. Az egy-csoport eredményekre támaszkodva azután két-csoport diffúziós — numerikus — számításokat végzünk, amely már elég nagy biztonsággal leírja a pulzált kísérlet minden lényeges aspektusát.

Egy-csoport diffúziós közelítésben analitikusan vizsgáltuk a (4.13)-ban szereplő

$$\frac{T_{\mu(d)}}{\alpha_{\mu(d)} + \lambda} \psi_{\mu(d)} \quad (4.35)$$

alakulását  $\mu(d)$  függvényében. Defináltuk a  $H_{\mu,0}(x)$  mennyiséget:

$$H_{\mu,0}(x) = \left| \frac{T_{\mu}}{T_0} \right| \cdot \frac{\alpha_0 + \lambda}{\alpha_{\mu} + \lambda} \cdot \frac{\psi_{\mu}(x)}{\psi_0(x)}, \quad (4.36)$$



ahol a (4.35)-beli  $\mu(d)$  index helyett egyszerűen  $\mu$ -t írtunk.  $H_{\mu,0}$  a  $\mu$ -ik harmonikusnak az alaplómódushoz való viszonya. (4.36) egyes tényezőit egy-csoport diffúziós közelítésben analitikusan előállíthatjuk

$$\begin{aligned} f_d(v) &= 1 \\ \hat{P}\Phi &= \nu \Sigma_f \Phi \\ \psi_\mu^+ &= \psi_\mu \end{aligned} \quad (4.37)$$

figyelembevételével és (4.27) felhasználásával. Az analitikusan kapott kifejezéseket azután numerikusan kell kiértékelni. A számítások részleteit [35] tartalmazza.

4.1 TÁBLÁZAT  
Az egy-csoport számításokban használt csoportállandók

	<i>zóna</i>	<i>reflektor</i>
$D$	0,76037	0,98736
$\Sigma_a$	$2,2725 \times 10^{-2}$	$3,6022 \times 10^{-4}$
$\nu \Sigma_f$	$2,2284 \times 10^{-2}$	0
$1/\nu$	$1,7728 \times 10^{-6}$	$4,3195 \times 10^{-6}$

A 4.1 táblázatban adott paraméterekkel jellemzett zóna és reflektor anyagokból összeállított öt rendszerben megnéztük  $H_{\mu,0}$  alakulását. Az öt rendszert úgy állítottuk be, hogy a reaktivitás mindegyikben  $-30 \$$  volt, de a zóna és reflektor méret változott. Ily módon a reflektáltság növelésének hatását kívántuk tanulmányozni.  $H_{\mu,0}$  alakulása a 4.2 táblázatban látható,  $\mu=1, 2, 3$ -ra,  $x=0$  esetén (a zóna közepén),  $S(C)$  és  $S(R)$  kezdeti eloszlások mellett. Látható, amit már korábban is tudtunk, hogy a  $C$ -pulzus kedvezőbb, mint az  $R$ -pulzus: a 3. oszlopban kisebbek a számok és gyorsabban csökkennek, mint a 4. oszlopban. Azt is látjuk viszont, hogy mind  $C$ -pulzus, mind  $R$ -pulzus esetén  $H_{\mu,0}$  konvergenciája jelentősen javul a reflektor vastagság növekedésével. Ennek alapján joggal várjuk, hogy erősen reflektált reaktorban a Sjöstrand módszer törvényszerűen jól alkalmazható, mert (4.13)-ban a magasabb harmonikusok járuléka ilyenkor elhanyagolható. Hogy ez valóban mindig így van, azt a most bemutatott egy-csoport eredményeken túlmenően két-csoport numerikus vizsgálatok és kísérleti eredmények bizonyítják.

#### 4.5 A Gozani módszer elmélete

A Gozani-féle reaktivitásmérési módszer [3] eredetileg egyszerűen csak annak a már említett gondolatnak a kivitelezése volt, hogy a terület-hányados módszerben a prompt alaplómódusra kellene szorítkozni. A Gozani módszer lényege az, hogy a kiértékelés során exponenciális illesztéssel kiválasztjuk a válaszgörbének azt a szaka-

## 4.2 TÁBLÁZAT

Egy-csoport modell-reaktor számítási eredmények

1	2	3	4
$b-a$ cm	$a$ cm	$H_{\mu 0}(x=0), \mu=1, 2, 3$ C-pulse	$H_{\mu 0}(x=0), \mu=1, 2, 3$ R-pulse
2,5	18,35	0,0381 0,0072 0,0022	0,346 0,185 0,115
5,0	16,53	0,0311 0,0047 0,0012	0,298 0,134 0,072
10,0	13,38	0,0176 0,0019 0,0004	0,211 0,074 0,036
20,0	9,29	0,0052 0,0004 0,0000	0,110 0,032 0,015
50,0	5,25	0,0006 0,0000 0,0000	0,037 0,010 0,004

szát, ahol a prompt alaplómódus bomlása egymagában megfigyelhető. Ez a legtöbb reaktortípusnál megtehető és  $\alpha_{0(p)}$ , valamint a hozzá tartozó amplitúdó  $N_0$  meghatározható. Ha eddigi szokásunknak megfelelően periódikus pulzálás helyett egyetlen neutronpulzus hatását vizsgáljuk (a kettő ekvivalenciáját l. 6.2-ben), a Gozani reaktivitás a következő

$$\beta_{GO} \equiv \frac{A_p^{(0)}}{A_d} = -\frac{\rho}{\beta}, \quad (4.42)$$

ahol

$$A_p^{(0)} = -\frac{N_0}{\alpha_{0(p)}}. \quad (4.43)$$

Hogy (4.42) valóban fennáll csak diffúziós közelítés termikus csoportjára, csupasz homogén rendszerre lehet egzaktul bizonyítani. (Pontosabban: a bizonyítható állításban a nevezőben  $A_d^{(0)}$  áll, de láttuk, hogy  $A_d \approx A_d^{(0)}$ , ezért itt nem teszünk különbséget.)

Elég hamar felismerték [14], hogy

$$A_p^{(0)}(\mathbf{r}, v) \sim \Phi_{0(p)}(\mathbf{r}, v) \quad (4.44)$$

és

$$A_d \approx A_d^{(0)}(\mathbf{r}, v) \sim \Phi_{0(d)}(\mathbf{r}, v) \quad (4.45)$$

miatt a (4.42)-ből kapott reaktivitás csak abban az esetben lehet térfüggetlen, ha

$$\Phi_{0(p)}(\mathbf{r}, v) = \Phi_{0(d)}(\mathbf{r}, v). \quad (4.46)$$



(Hogy itt az egyenlőséggel érvényes, vagy arányosságról van szó, az normálás kérdése.) Tekintve, hogy (4.46) általában nem igaz, (4.42) alapján nem lehet térfüggetlen mennyiséget kapni, ha viszont ez a mennyiség térfüggő, már nem lehet egyenlő a reaktivitással, mert az definíciója szerint térfüggetlen, integrális mennyiség. (4.46) nem teljesülését, a prompt és késő sajátfüggvények különbözőségét kinetikus torzulásnak nevezik. A ZR—4 reaktor egy-dimenziósmodelljében kiszámított  $\Phi_{0(p)}(\mathbf{r}, v_{th})$  és  $\psi_0(\mathbf{r}, v_{th}) \approx \Phi_{0(d)}(\mathbf{r}, v_{th})$  a 4.1 ábrán látható.

Már a 3. fejezetben említettük, hogy a (4.42) mérési utasítás korrigálható a sajátfüggvények hányadosával:

$$\mathcal{S}_{GO}^{korr} \equiv \frac{A_p^{(0)}}{A_d} \cdot \frac{\Phi_{0(d)}}{\Phi_{0(p)}} = -\frac{\varrho}{\beta} \quad (4.47)$$

A Gozani módszer tulajdonképpeni hibája az, hogy általában (4.47) sem teljesül. Ehelyett

$$-\frac{\varrho}{\beta} = \frac{1}{\gamma} \cdot \frac{A_p^{(0)}}{A_d} \cdot \frac{\Phi_{0(d)}}{\Phi_{0(p)}} \quad (4.48)$$

igaz, ahol  $\gamma \neq 1$ . Látni fogjuk, hogy  $\gamma \neq 1$  a magasabb módusokban jelentkező kinetikus torzulás következménye. Ha nincs kinetikus torzulás, akkor  $\gamma = 1$ . (4.48)-hoz hasonló összefüggést már [7]-ben is találunk, de  $\gamma$  pontos kifejezése és jelentőségének diszkussziója nélkül.  $\gamma$  megjelenésének általában nem tulajdonítottak jelentőséget [14, 15], mások egyenesen azt állítják, hogy a sajátfüggvények megfelelő normálása esetén  $\gamma = 1$  érhető el [34, 44]. Levezetésekben általában a Becker és Quisenberrytől származó (4.31) közelítő egyenleteket [14] használják. Gozani [6] megtalálja  $\gamma$  helyes alakját, amelyből látszik, hogy ha  $\gamma \neq 1$ , akkor semmilyen normálással sem tehető 1-gyel egyenlővé, de úgy gondolja, hogy mások a Becker—Quisenberry egyenletek közelítő volta miatt kaptak eltérő eredményt. Kosály és Valkó [30] rámutat arra, hogy az eltérésnek nem az egyenletekben levő csekély közelítés az oka, hanem egy sorozatosan elkövetett matematikai hiba, amely az összes említett levezetésben megtalálható. Szavakban elmondva egyszerűen arról van szó, hogy a Becker—Quisenberry egyenletek közül az  $A_p$ -re vonatkozó egyenletben egy ponton  $A_p$  helyére  $A_p^{(0)}$ -t írják be, megfelelően arról, hogy az egyenletet ez nem elégíti ki. [30]-ban részletesen tárgyaljuk az elkövetett hibát, és megadjuk a helyes levezetést is. Itt csak az utóbbival foglalkozunk.

Tekintsük az időfüggő  $\Phi(t, \mathbf{r}, v)$  fluxus prompt és késő részét külön-külön, a kinetikus sajátfüggvények szerint kifejtve a (2.23) és (2.24) egyenletek szerint. Az időintegrálok:  $A_p(\mathbf{r}, v)$  és  $A_d(\mathbf{r}, v)$  szintén írhatók az egyes módusok megfelelő integráljai összegeként.

$$A_p(\mathbf{r}, v) = \sum_{\mu(p)} A_{\mu(p)}(\mathbf{r}, v) \quad (4.49)$$

$$A_d(\mathbf{r}, v) = \sum_{\mu(d)} A_{\mu(d)}(\mathbf{r}, v), \quad (4.50)$$

ahol

$$A_{\mu(p)}(\mathbf{r}, v) = -\frac{T_{\mu(p)}}{\alpha_{\mu(p)}} \Phi_{\mu(p)}(\mathbf{r}, v), \quad (4.51)$$

illetve

$$A_{\mu(d)}(\mathbf{r}, v) = -\frac{T_{\mu(d)}}{\alpha_{\mu(d)}} \Phi_{\mu(d)}(\mathbf{r}, v). \quad (4.52)$$



Mint már több helyen utaltunk rá, a gyakorlatban [14]

$$A_d(\mathbf{r}, v) \approx A_d^{(0)}(\mathbf{r}, v). \quad (4.53)$$

A Gozani módszer eredeti mérési utasításában, (4.42)-ben ezt a közelítő egyenlőséget felhasználva, (4.51) és (4.52) alapján kapjuk, hogy

$$\$_{\text{Go}} \approx \frac{A_p^{(0)}}{A_d^{(0)}} = \frac{T_{0(p)}}{\alpha_{0(p)}} \frac{\alpha_{0(d)}}{T_{0(d)}} \cdot \frac{\Phi_{0(p)}}{\Phi_{0(d)}}. \quad (4.54)$$

Felhasználva a már korábban használt

$$\frac{\alpha_{0(d)}}{\alpha_{0(d)} + \lambda} \approx \$ \quad (4.55)$$

egyenlőséget, amely a (2.19) inhour egyenlet következménye, (4.54)-et (4.48)-cal összevetve kapjuk, hogy

$$\gamma = -\frac{T_{0(p)}}{\alpha_{0(p)}} \frac{\alpha_{0(d)} + \lambda}{T_{0(d)}}. \quad (4.56)$$

Ez a zárt kifejezés igen alkalmas arra, hogy numerikus vizsgálatokban  $\gamma$  számszerű értékét meghatározzuk. A  $\gamma$  tényező jelentőségének megértéséhez azonban úgy jutunk közelebb, ha (4.56)-ot tovább alakítjuk. Tekintsük ehhez a (4.5) összeg szabályt, alkalmazva ismét a

$$\Phi_{\mu(d)} \approx \psi_{\mu} \quad (4.57)$$

közelítést és a (2.17) ortogonalitási relációt. A

$$\frac{T_{0(d)}}{\alpha_{0(d)} + \lambda} = - \sum_{\mu(p)} \frac{T_{\mu(p)}}{\alpha_{\mu(p)}} \frac{(\psi_0^+, f_s \hat{P} \Phi_{\mu(p)})}{(\psi_0^+, f_s \hat{P} \Phi_{0(p)})} \quad (4.58)$$

összefüggést kapjuk, amit (4.56)-tal összevetve

$$\gamma = \left[ \sum_{\mu(p)} \frac{T_{\mu(p)}}{T_{0(p)}} \frac{\alpha_{0(p)}}{\alpha_{\mu(p)}} \frac{(\psi_0^+, f_s \hat{P} \Phi_{\mu(p)})}{(\psi_0^+, f_s \hat{P} \Phi_{0(p)})} \right]^{-1} \quad (4.59)$$

adódik. (4.59) vizsgálatából kitűnik, hogy a  $\gamma$  tényező 1-től való eltérését a kinetikus torzulás okozza. Ha

$$\Phi_{\mu(p)} \approx \psi_{\mu} \quad (4.60)$$

fennállna, akkor az ortogonalitási reláció következtében  $\gamma=1$  lenne. Itt megjegyezzük, hogy az említett hibás levezetésekben más szerzők (4.59) helyett olyan kifejezést kaptak, amelyben a nevezőben levő összegnek csak az első tagja szerepel. Ez azért nagy baj, mert a kinetikus torzulás éppen a magasabb rendű módusokban a legkifejezettebb, mert az  $\alpha_{\mu(p)}/v$  tag a (2.12) kinetikus sajátértékegyenletben  $\mu$  növekedésével  $D$  mellett egyre jelentősebb.  $\gamma$  erősen eltérhet az egységtől akkor is, amikor a kinetikus torzulás az alaplómódusban nem jelentős.

$\gamma$  számszerű értékének vizsgálata [32]-ben található. Egycsoport diffúziós közelítésben reflektált reaktort vizsgáltunk sík-geometriában. A zóna közép-síkjában



történt a neutronimpulzus bebocsátása.  $\gamma=0,905$  adódik, ami majdnem 10%-os hiba a Gozani mérésben. A sajátfüggvények úgy voltak normálva, hogy

$$(\psi_0^+, \hat{P}\psi_0) = (\psi_0^+, \hat{P}\Phi_{0(p)}),$$

amiért ez a  $\gamma$  érték kizárólag a  $\mu \neq 0$  módusok járuléka. Külön érdekes megemlíteni, hogy  $(1/\gamma - 1) = 0,105$  a következőképpen tevődik össze a  $\mu = 1, 2, 3, 4$  módusokból:

$$0,057 + 0,031 + 0,014 + 0,003 = 0,105,$$

ami mutatja a magasabb módusok semmiképpen sem elhanyagolható szerepét.

$\gamma$  értéke természetesen függ a reaktor tulajdonságaitól és a kísérlet elvégzésének körülményeitől is. Erre még visszatérünk a két-csoport numerikus eredményekről szóló 5.3 pontban.

## 5. Numerikus vizsgálatok

Ennek a fejezetnek az első két pontjában bemutatjuk azokat a numerikus eljárásokat, illetve programokat, amelyekkel a numerikus vizsgálatokat végeztük. A programok kifejlesztése — ismert hasonló programok felhasználásával — nagyrészt a szerző által vagy jelentős közreműködésével történt. A harmadik pontban a pulzált reaktivitásmérési módszerek vizsgálatának numerikus eredményeit ismertetjük.

### 5.1 Időfüggő számítások

A pulzált kísérlet numerikus szimulálásának legkézenfekvőbb módja olyan időfüggő számítást végezni a transzportelmélet valamilyen alkalmas közelítésében, amelyben a belőtt neutronimpulzus hatására létrejövő válaszfüggvény mint a hely, idő és energia függvénye kiszámítható. Erre a célra egy-dimenziós két-csoport diffúziós közelítést választottunk. A WIGLE nevű programot [36] adaptáltuk és továbbfejlesztettük, így kaptuk az RJW programokat [37], amelyeket a numerikus kísérletek első fázisában használtunk.

Az RJW programok közül RJW1 a statikus reaktivitás kiszámításához szükséges, RJW2 a tulajdonképpeni időfüggő program. RJW1-ben olyan visszacsatolást alkalmazunk, amely a reaktor stabil periódusát igyekszik növelni  $v\Sigma_f$  változtatásával. Ez a folyamat olyan iterációnak felel meg, amelyben

$$\frac{\partial \Phi}{\partial t} \rightarrow 0 \quad (5.1)$$

miközben

$$v\Sigma_f \rightarrow \frac{1}{k} v\Sigma_f, \quad (5.2)$$

ahol  $1/k$  a sokszorozási tényező reciproka, a keresett statikus reaktivitás pedig

$$\rho = 1 - \frac{1}{k}. \quad (5.3)$$

Az RJW programokban véges differencia módszert használunk időben is és térben is. Egy dimenziót lehet tárgyalni, sík-geometriában. A reaktort alkotó közegek anyagi jellemzőit a következő két-csoport állandók alkotják:

$$D_1, \Sigma_1, \chi_1, v\Sigma_{f1}, \frac{1}{v_1},$$

$$D_2, \Sigma_2, \chi_2, \Sigma_R, v\Sigma_{f2}, \frac{1}{v_2}$$

ezek: diffúziós állandó, teljes hatáskeresztmetszet, hasadási spektrum, hasadási hatáskeresztmetszet és reciprok sebesség, illetve  $\Sigma_R$  a „removal” hatáskeresztmetszet. ahol  $\Sigma_a$  jelentése abszorpciós hatáskeresztmetszet.

$$\Sigma_1 = \Sigma_{a1} + \Sigma_R, \quad \Sigma_2 = \Sigma_{a2}.$$

ahol  $\Sigma_a$  jelentése abszorpciós hatáskeresztmetszet.

A programmal a következő két-csoport diffúziós egyenleteket oldjuk meg:

$$\begin{aligned} \operatorname{div} D_1 \operatorname{grad} \Phi_1 - \Sigma_1 \Phi_1 + \chi_1 (v\Sigma_{f1} \Phi_1 + v\Sigma_{f2} \Phi_2) (1 - \beta) + \\ + \sum_i C_i \lambda_i + S_1 &= \frac{1}{v_1} \frac{\partial \Phi_1}{\partial t} \\ \operatorname{div} D_2 \operatorname{grad} \Phi_2 - \Sigma_2 \Phi_2 + \chi_2 (v\Sigma_{f1} \Phi_1 + v\Sigma_{f2} \Phi_2) (1 - \beta) + \\ + \Sigma_R \Phi_1 + S_2 &= \frac{1}{v_2} \frac{\partial \Phi_2}{\partial t} \\ -\lambda_i C_i + \beta (v\Sigma_{f1} \Phi_1 + v\Sigma_{f2} \Phi_2) &= \frac{\partial C_i}{\partial t}, \quad i = 1, \dots, M. \end{aligned} \quad (5.4)$$

A térbeli probléma megoldása direkt inverzióval történik (elimináció és helyettesítés módszere) minden időlépésben. Az idő-deriváltat

$$\frac{\partial \Phi}{\partial t} \approx \frac{\Phi^{j+1} - \Phi^j}{\Delta t^j} \quad (5.5)$$

szerint közelítjük, amit azután a  $(t^{j+1}, t^j)$  időintervallum közepéhez rendelünk, vagyis a  $\Sigma \Phi$  alakú tagok helyett

$$\frac{1}{2} (\Sigma^{j+1} \Phi^{j+1} + \Sigma^j \Phi^j) \quad (5.6)$$

kifejezést tekintünk.  $\Delta t^j$ -vel  $(t^{j+1} - t^j)$ -t jelöltük. (Mint az indexelésből kitűnik, ez a módszer lehetővé teszi, hogy a rendszer bármely jellemzőjét tetszőleges idő-lépésnél megváltoztassuk. Ezt az RJW1 program használja ki.)

Az (5.5)–(5.6) centrális differencia módszer parabolikus differenciálegyenletek megoldására feltétel nélkül stabil [38], az adott esetben azonban ez nem bizonyult elegendőnek. Rövid kezdeti tapasztalat megmutatta, hogy bár a numerikus eljárás abszolút hibája nem növekszik, miközben a tárgyalt effektus (a  $\Phi$  válaszgörbe)



nagy mértékben lecsökken (a prompt módusok elbomlásával) a hiba végül is meghamisíthatja az eredményt. Szavakban elmondva a következőkről van szó. Adott kezdeti eloszlás felgerjeszti a legkülönbözőbb prompt módusokat, amelyek azután a megfelelő bomlási állandóval csökkennek. Ha az alkalmazott numerikus módszerben  $\Delta t$ -t úgy választjuk meg, hogy ez a minket érdeklő folyamatok sebességéhez igazodjék, vagyis úgy, hogy a prompt bomlást néhány  $100\Delta t$  fedje le, és kb. ugyanennyi a késő részt, akkor a fellépő, de minket különösebben nem érdeklő magasabb módusok, amelyeknek a bomlási állandója abszolút értékben igen nagy, nem képesek lebomlani a nekik nem megfelelő  $\Delta t$  miatt. A prompt rész számításánál ez nem okoz bajt, mert ezek kis amplitúdóval szerepelnek, de a több nagyságrenddel kisebb késő részben hirtelen előbukkannak. Pontosabban a következőkről van szó [37]. A

$$\frac{\partial \Phi}{\partial t} = Dv \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} + A\Phi \quad (5.7)$$

alakú diffúziós egyenletet numerikusan így közelítjük

$$\frac{\Phi^{j+1} - \Phi^j}{\Delta t} = \frac{Dv}{2\Delta x^2} (\delta^2 \Phi^{j+1} + \delta^2 \Phi^j) + \frac{1}{2} A(\Phi^{j+1} + \Phi^j). \quad (5.8)$$

Ezt kielégíthetjük  $\Phi_k^j = R_k \cdot T_j$ -vel, ahol  $R_k$  a

$$Dv \frac{\delta^2 R_k}{\Delta x^2} + AR_k + \alpha R_k = 0 \quad (5.9)$$

sajátértékegyenletből határozható meg,  $T_j$ -re pedig azt kapjuk, hogy

$$T_j = T_0 \left( \frac{1 - \frac{1}{2} \alpha \Delta t}{1 + \frac{1}{2} \alpha \Delta t} \right)^j \quad (5.10)$$

(5.8) általános megoldása a különböző sajátértékekhez tartozó megoldások szuperpozíciója lesz. (5.10)-et így írhatjuk

$$T_j = T_0 e^{j \ln \left( \frac{1 - \frac{1}{2} \alpha \Delta t}{1 + \frac{1}{2} \alpha \Delta t} \right)}, \quad (5.11)$$

ahonnet sorfejtéssel látszik, hogy ha  $\alpha \Delta t \ll 2$ .

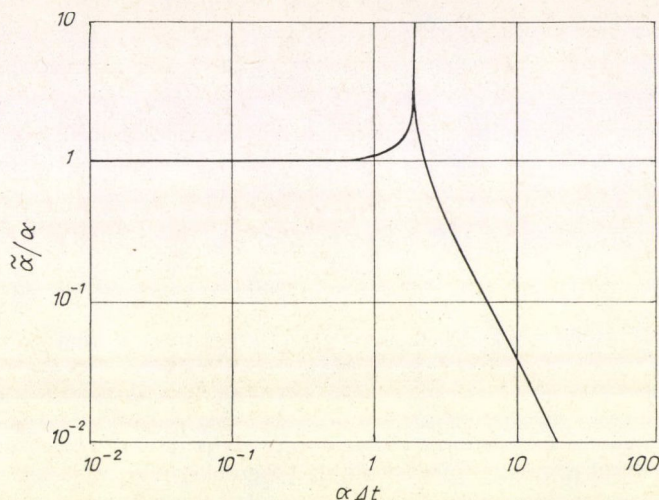
$$T_j \approx T_0 e^{-\alpha j \Delta t} = T_0 e^{-\alpha t_j}, \quad (5.12)$$

vagyis a numerikus  $T_j$  exponenciálisan függ  $t_j$ -től. Ha  $\alpha \Delta t$  nagyobb, ez nem így lesz. Bevezetjük az  $\tilde{\alpha}$  mennyiséget:

$$|T_j| = T_0 e^{-\tilde{\alpha} t_j} \quad (5.13)$$



$\tilde{\alpha}$  és  $\alpha$  viszonyát az 5.1 ábrán tanulmányozhatjuk. Itt abszolút értéket tüntetünk fel, mert  $\alpha \Delta t > 2$  esetén a  $T_j$  mennyiség  $(-1)^j$  szerint előjelet vált. Látható, hogy  $\tilde{\alpha}$  oly mértékben különbözhet  $\alpha$ -tól, hogy egyes módusok (éppen azok, amelyekről azt várnánk, hogy rendkívül gyorsan lebomoljanak és eltűnjenek) gyakorlatilag örökké fennmaradnak. A leírt effektus, amelyet a bomlásgörbe késő részének „felkunkorodásából” vettünk észre,  $\Delta t$  megfelelő választásával kiküszöbölhető. (Hasonló tapasztalatról olvashatunk egy időközben megjelent numerikus analízis könyvben [49].)



5.1 ábra. A numerikusan számított exponenciális időállandó (látszólagos időállandó) viselkedése  $\alpha \Delta t$  függvényében

Az RJW programok használata igen szemléletes, a kiszámított  $\Phi(r_k, t_j)$  kétváltozós válaszgörbéből (csak a termikus fluxust használtuk!) kiválasztjuk azokhoz az  $r_k$  értékekhez tartozó  $\Phi_{r_k}(t_j)$  „metszeteket”, ahol „detektort” akarunk elhelyezni, és a továbbiakban úgy járunk el, mintha a  $\Phi_{r_k}(t_j)$  görbét valódi mérésből kaptuk volna. Eleinte ezt a módszert követtük, lényegében ugyanazokat az illesztő programokat használtuk, mint a mérések kiértékelésében.

Ennek a módszernek több előnye volt. Meggyőződünk pl. arról, hogy a válaszgörbe késő részét valóban az alpmódus dominálja, és hogy ennek térfüggése gyakorlatilag egybeesik a statikus alpmódusával (l. (4.14) és a 4.4 pont elején tett megjegyzéseket erről). Ugyanakkor könnyű észrevenni, hogy ha csak a terület-hányados módszerek érdekelnek, csupa olyan mennyiséggel van dolgunk, amelyek az időnek nem függvényei, hiszen idő szerinti integrálással kapjuk őket. Éppen ezért nem meglepő, hogy a szereplő  $A$ ,  $A_p$ ,  $A_d$  területek a statikus sajátértékegyenlethez nagyon hasonló jellegű egyenleteket elégítenek ki. Ennek az ad nagy jelentőséget, hogy (2.7) megoldására fejlett és általánosan elterjedt módszerek, program rendszerek állnak rendelkezésre.



## 5.2 Az időintegrálok közvetlen számítása

Becker és Quisenberry [14] közelítő egyenleteket vezettek le, amelyeket  $\Phi_p$ , illetve  $\Phi_d$  külön-külön, igen jó közelítéssel elégítenek ki. A közelítésre vonatkozó feltevéseket [14]-en kívül lásd még [39]-ben.

$$[(1-\beta)f_p\hat{P}-\hat{D}]\Phi_p+S=\frac{1}{v}\frac{\partial\Phi_p}{\partial t}$$

$$[(1-\beta)f_p\hat{P}-\hat{D}]\Phi_d+f_d\lambda C=\frac{1}{v}\frac{\partial\Phi_d}{\partial t}$$

$$\beta\hat{P}(\Phi_p+\Phi_d)-\lambda C=\frac{\partial C}{\partial t}.$$

Innen a (4.9) és (4.10) definíciók alapján integrálással kapjuk a területekre vonatkozó egyenleteket:

$$[(1-\beta)f_p\hat{P}-\hat{D}]A_p=-S(\mathbf{r},v) \quad (5.14)$$

$$[f_s\hat{P}-\hat{D}]A_d=-\beta f_p\hat{P}A_p. \quad (5.15)$$

Ha a pulzált forrást  $S(\mathbf{r},v)\delta(t)$  jellemzi, az egyenletekbe egyszerűen ezt az  $S(\mathbf{r},v)$ -t kell írni.

Az  $A=A_p+A_d$  összefüggés felhasználásával felírható még a totál terület egyenlete:

$$[f_s\hat{P}-\hat{D}]A=-S(\mathbf{r},v). \quad (5.16)$$

A Gozani módszerhez szükség van a prompt alapmódus alatti területre,  $A_p^{(0)}$ -ra is. Ehhez először (2.12)-t kell megoldani  $\alpha_{0(p)}$  érdekében.  $|\alpha_{0(p)}|\gg\lambda$  miatt (2.12) helyett elegendő az

$$(1-\beta)f_p\hat{P}\Phi_{0(p)}=\left(\hat{D}+\frac{\alpha_{0(p)}}{v}\right)\Phi_{0(p)} \quad (5.17)$$

egyenletet használni. Innen  $\alpha_{0(p)}$ -n kívül megkapjuk a  $\Phi_{0(p)}$  alakfüggvényt is, de  $A_p^{(0)}$ -hoz a  $T_{0(p)}$  amplitúdó is kell.  $T_{0(p)}$  meghatározása érdekében tekintsük (4.27)-et, de vegyük figyelembe ismét, hogy  $|\alpha_{0(p)}|\gg\lambda$ , aminek alapján meg lehetne mutatni, hogy (4.27)-ben a második tényező alig különbözik egytől, ezért

$$T_{0(p)}=\frac{(\Phi_{0(p)}^+,S)}{\left(\Phi_{0(p)}^+,\frac{1}{v}\Phi_{0(p)}\right)} \quad (5.18)$$

használható.  $A_p^{(0)}$  definíciója,

$$A_p^{(0)}=\int_0^\infty T_{0(p)}e^{\alpha_{0(p)}t}dt\cdot\Phi_{0(p)} \quad (5.19)$$

alapján innen

$$A_p^{(0)}=-\frac{1}{\alpha_{0(p)}}\frac{(\Phi_{0(p)}^+,S)}{\left(\Phi_{0(p)}^+,\frac{1}{v}\Phi_{0(p)}\right)}\Phi_{0(p)} \quad (5.20)$$

adódik.



A terület-hányados módszerek szisztematikus tanulmányozásához minden esetben  $A_p$ ,  $A_d$  és  $A_p^{(0)}$  előállítása szükséges. Ehhez, mint mondtunk, csupa olyan egyenletet kell megoldani, amelyek erősen hasonlítanak a statikus sajátértékegyenlethez, amelyet viszont a szokásos kritikussági kódokkal tudunk tárgyalni. Az ezekben alkalmazott forrás-iterációs módszer [41] különösebb probléma nélkül lehetővé teszi az inhomogén egyenletek kezelését is.

Valamivel pontosabban a következőképpen járunk el. Először megoldjuk az (5.14) és (5.16) egyenleteket. Ezek inhomogén egyenletek.  $A_d$ -t mint  $A - A_p$  állítjuk elő. Ezután (5.17)-ben  $\alpha_{0(p)}$ -re kezdőértéket veszünk fel, és az eredetileg kritikussági számításokra való programban a kapott  $k_{\text{eff}} \neq 1$  voltából tudjuk, hogy a felvett kezdőérték nem volt jó.  $\alpha_{0(p)}$ -t változtatva keressük azt az értéket, amelynél  $k_{\text{eff}} = 1$ . (Erre azért van szükség, mert ezek a programok a  $k_{\text{eff}}$  sajátérték, nem pedig az  $\alpha$  sajátérték beiterálására íródtak.) Ha  $\alpha_{0(p)}$  megvan,  $\Phi_{0(p)}$ -t tároljuk, és (5.17) adjungáltját képezve meghatározzuk  $\Phi_{0(p)}^+$ -t is, amellyel  $A_p^{(0)}$  előállítható.

Az általunk használt program a SISYPHUS statikus programból [42] kifejlesztett DAREA [40] program volt. Ebben két tér-dimenziót és max. 4 energia csoportot lehet tárgyalni. Ennek megfelelően a meghatározott területeket

$$A = A(\mathbf{r}, g)$$

alakban célszerű írni, ahol az  $\mathbf{r}$  változó az  $R-Z$  vagy  $X-Y$  geometria lehetséges rácspontjaiba mutat,  $g$  pedig az energia csoport index.

Ha feltételezzük, hogy  $\alpha_{0(p)}$  iterálása 4 lépésben már bekonvergál, akkor is 7 statikus futást kell végezni egyetlen DAREA feladat elvégzéséhez. Emiatt nagy jelentősége volt a munkánkban annak, hogy a program a 7 feladat egymásutánosságát és az összes járulékos számítást automatikusan végezte. Egy kritikussági feladat szokásos adatain kívül meg kellett adni természetesen azokat a mennyiségeket, amelyek ott nem szerepelnek, mint  $f_p(v)$ ,  $1/v$ ; de ezen túlmenően csak az  $S(\mathbf{r}, v)$  forrás eloszlást kellett megadni. A DAREA program outputja tartalmazza az idő-integrálokat:  $A(\mathbf{r}, g)$ ,  $A_p(\mathbf{r}, g)$ ,  $A_p^{(0)}(\mathbf{r}, g)$ ,  $A_d(\mathbf{r}, g)$ , valamint a Sjöstrand és Gozani reaktivitásokat, ugyancsak minden pontban és minden energia csoportban:  $S_{\text{SJ}}(\mathbf{r}, g)$ , illetve  $S_{\text{G0}}(\mathbf{r}, g)$ .

A DAREA program alkalmasnak látszik arra, hogy ha a területhányados módszert mint kísérleti technikát használjuk, akkor minden zóna-típusnál vagy egyéb jelentős változtatásnál segítségével numerikusan megvizsgáljuk a módszerek alkalmazhatóságát.

### 5.3 Két-csoport numerikus kísérletek

Mint említettük a reflektor szerepét bemutató 4.4 pontban, a két-csoport diffúziós közelítésben végzett számításokat numerikus kísérleteknek nevezzük, amivel arra is utalunk, hogy feltételezzük, hogy ebben a közelítésben már visszatükröződik — legalábbis kvalitatíve — a pulzált kísérlet minden lényeges mozzanata. Numerikus kísérletnek nevezzük ezeket a számításokat azért is, mert a közelítés olyan bonyolult, hogy analitikusan semmi támpontot sem kaphatunk az egyes mennyiségek viselkedéséről, vagyis információt csak egy-egy „kísérlet” elvégzése, jelen esetben egy-egy feladat lefuttatása jelent. A valóságos kísérletekhez képest a numerikus modell



valamivel szegényebb, egyszerűbb világot képvisel, de mint említettük, azt tételezzük fel, hogy azért minden lényeges elem ebben a közelítésben már benne van; ugyanakkor jelentősen kihasználjuk azt, hogy ebben a közelítésben pontosan ki tudjuk számítani a kísérlettel meghatározandó mennyiséget, jelen esetben a statikus reaktivitást.

A numerikus kísérletekkel az volt a célunk, hogy megvizsgáljuk a Gozani és Sjöstrand módszerek által adott reaktivitások ( $S_{G0}$ , illetve  $S_{SJ}$ ) viselkedését, a valódi statikus reaktiváshoz való viszonyát a kezdeti eloszlás és a reflektáltság függvényében, különböző mértékű szubkritikusság mellett. Ezzel elméleti eredményeinket kívánjuk alátámasztani, illetőleg az elméleti és valódi reaktoron végzett kísérleti eredmények összevetését lehetővé tenni.

A két-csoport diffúziós numerikus kísérleteket két részben végeztük [22, 35]. Az első sorozat idején még nem ismertük a legkedvezőbb forrás eloszlás fogalmát, nem volt meg a kellő elméleti felkészültségünk a reflektáltság szerepének tárgyalására. Elsősorban a különböző forrás alakok hatását vizsgáltuk. A két-pont modellben végzett analitikus tájékozódás hatására [27, 32] a forrás alak jellemzésére bevezettük az  $S_R/S_C$  mennyiséget, amely a reflektorba lőtt forrás neutronok száma osztva a zónába lőtt forrás neutronok számával.  $S_R/S_C$  kis értékei zónában koncentrált forrást, nagy értékei pedig reflektorban koncentrált forrást jelentenek.

Kétféle rendszert vizsgáltunk: az I. rendszer vízzel reflektált, a II. rendszer grafitral reflektált volt. A zóna anyag mindkettőben azonos. A megfelelő csoportállandók az 5.1 táblázatban találhatók.

### 5.1 TÁBLÁZAT

Az RJW numerikus kísérletekben használt két-csoport állandók

6	Zóna	Víz-refl.	Grafit-refl.
$\Sigma a_1$	$3,7018 \times 10^{-3}$	$6,3362 \times 10^{-4}$	$7,9602 \times 10^{-6}$
$\Sigma a_2$	$6,845 \times 10^{-2}$	$2,203 \times 10^{-2}$	$3,124 \times 10^{-4}$
$\Sigma_R$	$3,2005 \times 10^{-2}$	$5,9132 \times 10^{-2}$	$4,4936 \times 10^{-2}$
$\nu \Sigma_{f1}$	$2,9729 \times 10^{-3}$		
$\nu \Sigma_{f2}$	$1,068 \times 10^{-1}$		
$\beta_{eff}$	0,0075		
$\lambda$	0,1		
$D_1$	1,2566	1,2007	1,4628
$D_2$	$1,9957 \times 10^{-1}$	$1,2082 \times 10^{-1}$	$8,9603 \times 10^{-1}$
$1/v_1$	$5,8478 \times 10^{-8}$	$7,8177 \times 10^{-8}$	$1,2759 \times 10^{-7}$
$1/v_2$	$3,523 \times 10^{-6}$	$4,545 \times 10^{-6}$	$4,545 \times 10^{-6}$

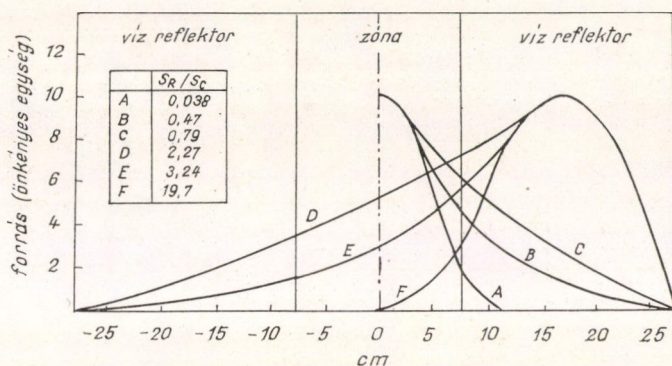
A vizes rendszerben a zóna vastagsága 15,65 cm volt, a grafitos rendszerben 10,0 cm. Különböző szubkritikus állapotokat állítottunk be a termikus abszorpciós hatáskeresztmetszet változtatásával.

A forrás időben mindig  $\delta$ -függvény volt, különböző térbeli alakjait pedig az 5,2 és 5.3 ábrákon láthatjuk. A különböző forrás alakok különböző  $S_R/S_C$  értékeket képviselnek, az  $A$ -val jelölt, zónában koncentrált forrás eloszlástól ( $S_R/S_C=0,04$ ) az  $F$ -fel jelölt, reflektorban koncentrált pulzusig ( $S_R/S_C=30$ ).

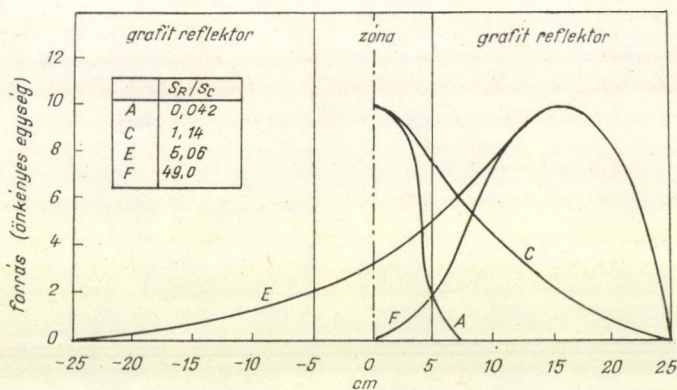
Az  $A$  és  $F$  görbéket meglehetősen szélsőségeseknek tekintettük, feltételeztük, hogy egy valóságos pulzált kísérletben az effektív kezdeti eloszlás valahol ezek között



helyezkedik el. (Később észrevettük, hogy még  $A$  és  $F$ -nél is szélsőségesebb kezdeti eloszlásokkal, a már említett  $C$ - és  $R$ -pulzusokkal ((4.36) és (4.37) egyenletek) nagyszerűen be lehet határolni azt a tartományt, ahová a valóságos mérési eredmények eshetnek.)



5.2 ábra. Kezdeti neutroneloszlások a vizes rendszerben



5.3 ábra. Kezdeti neutroneloszlások a grafitos rendszerben

A numerikus eredmények az 5.4 és 5.5 ábrákon láthatók a vízzel, illetve grafitral reflektált rendszerekre.

Az előbbin négy, az utóbbin két különböző reaktiváshoz tartozó  $S_{SJ}$  és  $S_{G0}$  görbék vannak feltüntetve. Minden esetben a statikus reaktivitást vékony vízszintes vonallal jelöltük. A  $S_{SJ}$  és  $S_{G0}$  reaktivításokat az 5.1 pontban leírt módon kaptuk. Meg kell jegyezni, hogy míg valóságos kísérletekben a periódikus pulzálás miatt a választásgörbére

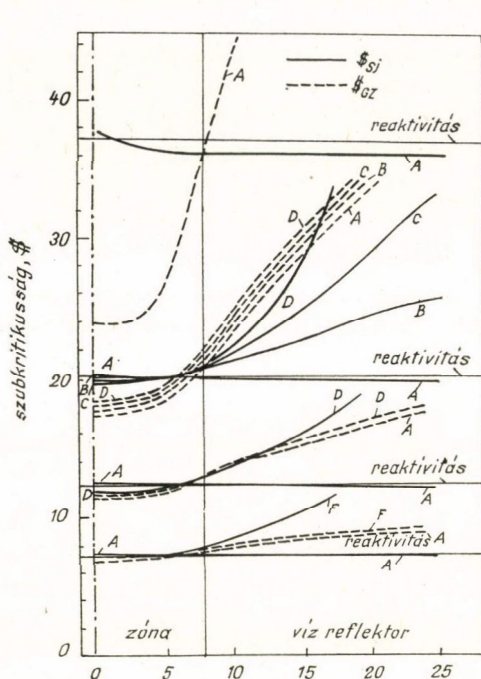
$$N_0 e^{\alpha t} + B \quad (5.21)$$

alakú függvényt illesztnek, az RJW számításokban

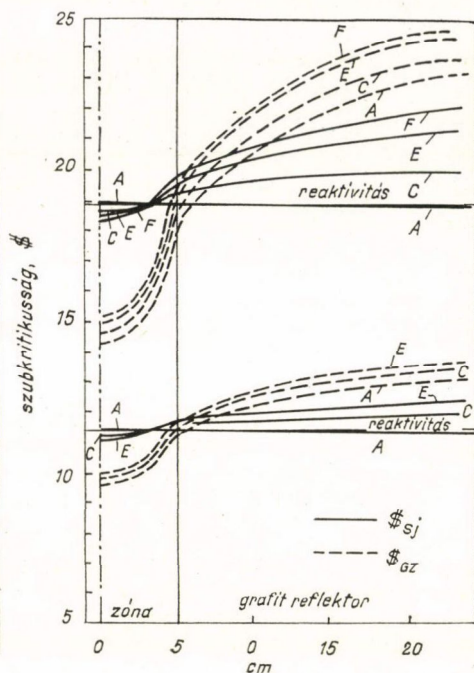
$$N_0 e^{\alpha_0 t} + N_1 e^{\alpha_1 t} \quad (5.22)$$



szerepelt. Az első exponenciális írja le a prompt részt — miután a prompt felharmonikusok már lebomlottak —, a második pedig a késő részt. Az a tény, hogy a számított görbét valóban tökéletesen le lehet írni (5.22)-vel, azt is bizonyítja, hogy a késő rész egyetlen exponenciálisból, az alapl módusból áll — legalábbis a késő felhar-



5.4 ábra.  $S_{Sj}$  és  $S_{G0}$  reaktivitás becslések a detektorhelyzet függvényében a vízzel reflektált rendszerben



5.5 ábra.  $S_{Sj}$  és  $S_{G0}$  reaktivitás becslések a detektorhelyzet függvényében a grafitval reflektált rendszerben

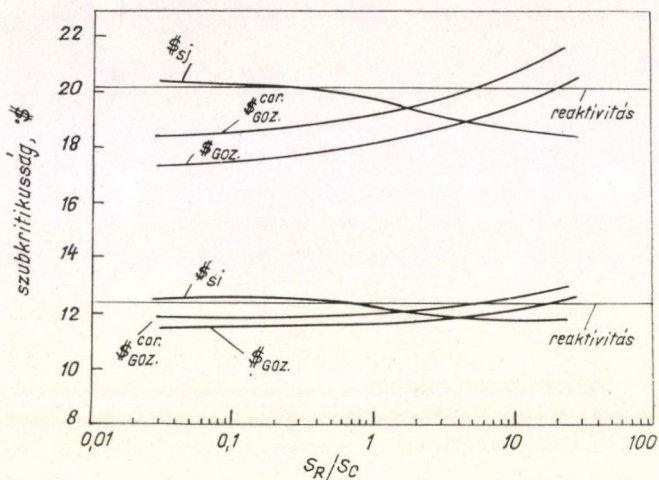
monikusok járuléka elhanyagolhatóan kicsi. Ennek azért van jelentősége, mert minden levezetésben kihasználtuk az

$$A_d \approx A_d^{(0)} \quad (5.23)$$

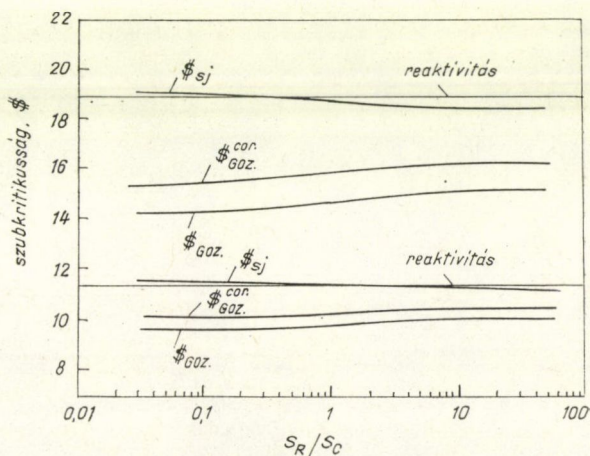
egyenlőséget.

Az 5.4 és 5.5 ábrákról leolvasható, hogy a vizsgált esetekben a Sjöstrand módszer általában jobb, mint a Gozani módszer, amennyiben  $S_{Sj}$  térfüggése enyhébb és a reaktor nagyobb részében a valódi statikus reaktivitás közelében van. Itt jól látható a kezdeti eloszlás hatása. A Gozani módszernél ez nem befolyásolja számottevően a görbe alakját, ugyanis  $A_p^{(0)}(\mathbf{r}, v)$ , mint  $\Phi_{0(p)}(\mathbf{r}, v)$  a kezdeti eloszlástól független. A Sjöstrand eredmények erősen függenek a kezdeti eloszlástól. Megjegyezzük, hogy az itt szereplő aszimmetrikus kezdeti eloszlásokhoz tartozó  $S_{G0}(x)$  és  $S_{Sj}(x)$  görbék oly módon lettek szimmetrizálva, mintha az  $(x)$  és  $(-x)$  helyeken levő 1—1 detektor közös jelét használtuk volna. Ha csak egy detektort használunk,  $S_{Sj}(x)$  viselkedése sokkal kedvezőtlenebb. Érdekes megfigyelni, hogy valóságos

kísérleteknél, akármennyire aszimmetrikusan helyezzük is el a forrást,  $\$S_j(r)$  sohasem annyira térfüggő, mint az aszimmetrikus numerikus kísérletekben, sőt többnyire reflektált reaktorokban még a szimmetrizált D, E, F eredményeknél is enyhébb térfüggést tapasztalunk. Ennek csak az lehet a magyarázata, hogy a numerikus kísérletekben használt effektív kezdeti neutroneloszlás, ahogy a 4.3 pontban kifejtettük, a rendszer tulajdonságai folytán eleve nem lehet nagyon aszimmetrikus és reflektált reaktorokban pedig kifejezetten zónában koncentrált, szimmetrikus elhelyezkedésű.



5.6 ábra. A zóna közepén számított reaktivitás becslések a forrásalakat jellemző  $S_R/S_C$  paraméter függvényében a vízzel reflektált rendszerben



5.7 ábra. A zóna közepén számított reaktivitás becslések a forrásalakat jellemző  $S_R/S_C$  paraméter függvényében a grafitval reflektált rendszerben



A különböző alakú kezdeti eloszlásokat az  $S_R/S_C$  paraméterrel jellemeztük, ezért nem érdektelen átrajzolni az 5.4 és 5.5 ábrákat úgy, hogy ennek a mennyiségnek a függvényében láthassuk  $S_{G0}$  és  $S_{SJ}$  viselkedését. Az 5.6 és 5.7 ábrákon, 2—2 reaktivitás érték mellett ezek mellé még felvettük a (4.47) szerint korrigált  $S_{G0}^{korr}$  mennyiséget is. Látható, hogy a térfüggetlen szemben korrigált Gozani módszer sem adja vissza a statikus reaktivitást. Ennek az oka a 4.5 pontban tárgyalt  $\gamma$  tényező megjelenése. A numerikus kísérletekben meghatároztuk a megfelelő  $\gamma$  értékeket, ezek az 5.2 és 5.3 táblázatokban találhatók.

## 5.2 TÁBLÁZAT

A  $\gamma$  tényező számértékei a két-csoport numerikus kísérletekben két szélsőséges kezdeti eloszlás mellett a vízzel reflektált rendszerben

$\rho$ (\$)	$\gamma$ Értékek	
	'A' pulzus	'B' pulzus
7,33	0,9	1,006
12,4	0,95	1,03
20,2	0,908	1,06
37,2	0,739	1,08

## 5.3 TÁBLÁZAT

A  $\gamma$  tényező számértékei a két-csoport numerikus kísérletekben két szélsőséges kezdeti eloszlás mellett a grafitral reflektált rendszerben

$\rho$ (\$)	$\gamma$ Értékek	
	'A' pulzus	'F' pulzus
6,56	0,928	0,981
11,4	0,87	0,92
18,9	0,806	0,866

A numerikus kísérletek második szakaszában a fő hangsúly a reflektor szerepének vizsgálatán volt. Különböző vastagságú grafit reflektorral körülvett dúsított urán-vizes zónát tekintettünk. A zóna és reflektor két-csoport állandói az 5.4 táblázatban vannak, míg a különböző reflektor vastagságokat és zóna méreteket az 5.5 táblázatban adjuk meg. Ezeket úgy választottuk meg, hogy a reaktivitás mind-egyikben kb.  $-30 \$$  legyen.

Ezeket a számításokat a DAREA programmal [40] végeztük. A neutronforrás időben itt is  $\delta$ -függvény és az összes forrásneutron a gyors csoportban jelenik meg. A forrás térbeli alakja a már említett C- és R-pulzusok, (4.36), illetve (4.37) voltak,

## 5.4 TÁBLÁZAT

A két-csoport numerikus kísérletekben használt csoportállandók

	Zóna	Reflektor
$D_1$	1,260	1,062
$D_2$	0,1946	0,6580
$\Sigma_{a1}$	$2,868 \times 10^{-3}$	$1,085 \times 10^{-5}$
$\Sigma_{a2}$	$4,584 \times 10^{-2}$	$3,790 \times 10^{-4}$
$\Sigma_R$	$3,572 \times 10^{-2}$	$0,158 \times 10^{-3}$
$\nu \Sigma_{f1}$	$1,487 \times 10^{-3}$	0,
$\nu \Sigma_{f2}$	$4,584 \times 10^{-2}$	0,
$1/\nu_1$	$6,4597 \times 10^{-8}$	$1,3077 \times 10^{-7}$
$1/\nu_2$	$3,7075 \times 10^{-6}$	$4,5454 \times 10^{-6}$



kivéve egy esetet, ahol azt ellenőriztük, hogy „közbülsőnek” tűnő forrás alakok hatására valóban olyan  $\$_{G0}$  és  $\$_{SJ}$  értékek jönnek létre, amelyek a C- és R-pulzusoknak megfelelő  $\$_{G0}$  és  $\$_{SJ}$  értékek közé esnek.

A numerikus eredmények az 5.8, 5.9, 5.10 és 5.11 ábrákon láthatók. Itt is vízszintes vonal jelzi a függetlenül számított statikus reaktivitást.

A numerikus eredmények értékelésénél nyilvánvalóan nem az egyes mennyiségek számszerű értékeit kell tekinteni, hanem a bennük visszatükröződő tendenciákat, amelyeket elméleti következtetéseinkkel, illetőleg valódi mérési eredményekkel le-

### 5.5 TÁBLÁZAT

Kétcsoport numerikus kísérletekben használt  
zóna konfigurációk

Konfiguráció	Reflektor vastagság (cm)	Zóna félszélesség (cm)	Reaktivitás (- $\beta$ )
a	5	15,9	29,2
b	10	12,6	29,3
c	20	8,4	29,3
d	40	5,0	30,7

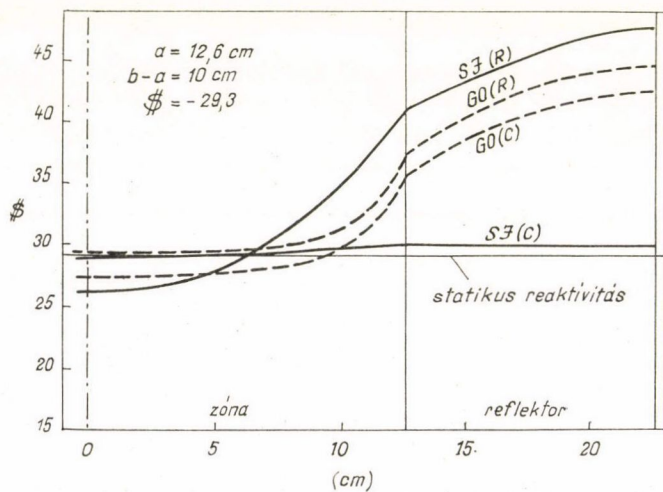
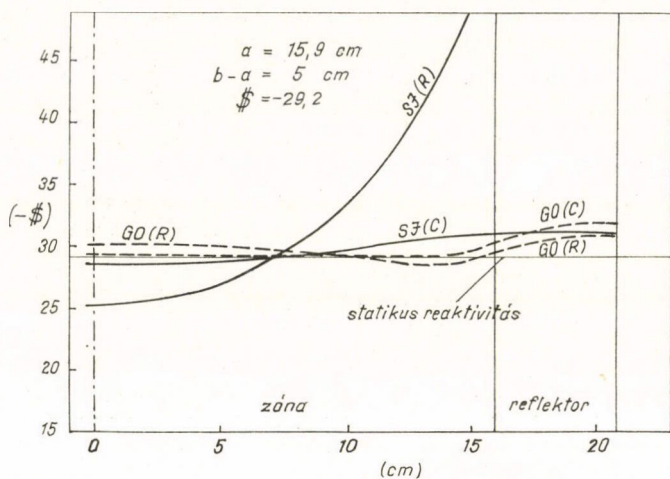
het összevetni. Ennek megfelelően a közölt ábrákról leolvasható, hogy a Sjöstrand reaktivitás  $SJ(C)$  és  $SJ(R)$  által határolt „lehetséges” tartománya szűkül, és a statikus reaktivitáshoz közeledik, ahogy az egyre erősebben reflektált rendszerek felé haladunk. Az erősen reflektált rendszerekben a Sjöstrand reaktivitás térfüggése enyhébb, mint a kevésbé reflektáltakban. Ismét megfigyelhető, hogy a C-pulzusok mennyivel előnyösebbek, mint az R-pulzusok. A legkedvezőbb forrás alak ismeretében ez egészen természetes (lásd 4.3 pont).

Az 5.12 ábrán látható néhány átmeneti forrás alak az extrém C- és R-pulzusok között. Az 5.13 ábrán pedig megfigyelhetjük, hogy a hozzájuk tartozó  $\$_{SJ}(x)$  görbék tényleg közbül esnek a C- és R-pulzusok megfelelő görbéinek. Fontos észrevenni, hogy a bemutatott erősen reflektált rendszerben a T1 és T2 forrás alakok az egész zónában és még a reflektor tekintélyes részében is a statikus reaktivitáshoz közel eső  $\$_{SJ}$  értékeket adnak. Ez azt jelenti, hogy bár a T1 és T2 alakokat ránézésre nem tekintenénk a legkedvezőbb forrás alakhoz, (4.29)-hez nagyon hasonlóknak, az itteni végeredmény szempontjából ezek igenis hasonlóak. Ezáltal némi fogalmat alkothatunk arról, mit értsünk hasonlóságon, amikor a 4.3 pont végén felvetett kérdésre próbálunk válaszolni.

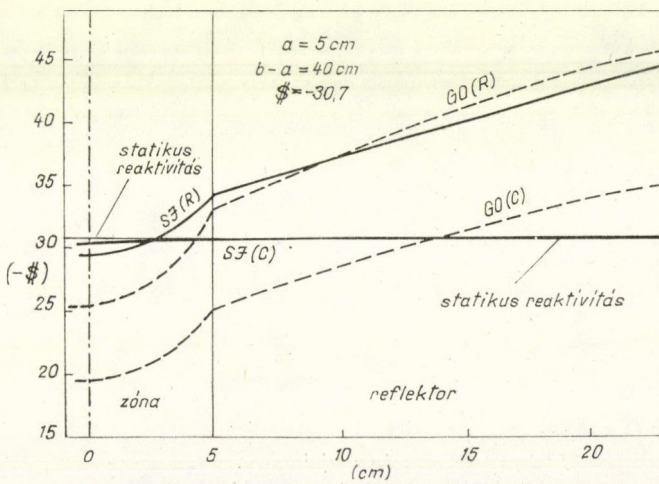
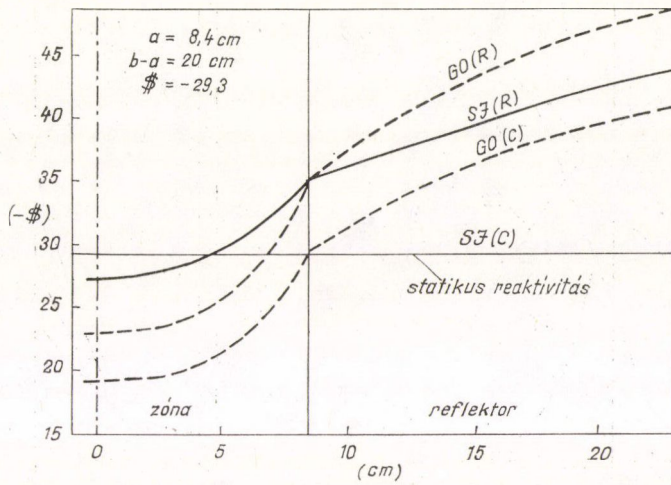
A 4.5 pontban definiált  $\gamma$  tényezőt is meghatároztuk, és az 5.14 ábrán mutatjuk be  $\gamma$  sajátos viselkedését a reflektor vastagság függvényében, különböző forrás alakok mellett. (Csak C- és R-pulzusra van meg a teljes görbe, a 4 átmeneti forrás alakkal csak a 20 cm-es reflektor vastagsághoz tartozó 1—1 pontot számítottuk ki.)

A numerikus eredmények tárgyalására még egyszer röviden visszatérünk majd a 7. fejezetben, amikor a valódi kísérleti eredményekkel való összehasonlításról lesz szó.



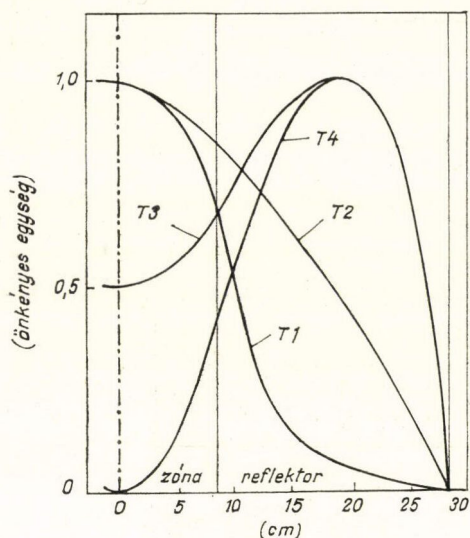


5.8—5.11 ábrák. Két-csoport numerikus kísérletekben nyert Sjöstrand és Gozani reaktivások térfüggése zónában koncentrált (C) kezdeti eloszlás és reflektorban koncentrált (R) kezdeti eloszlás mellett, változó reflektáltságú zónákban

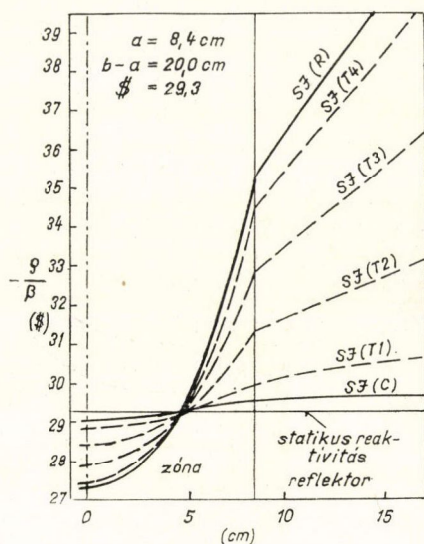
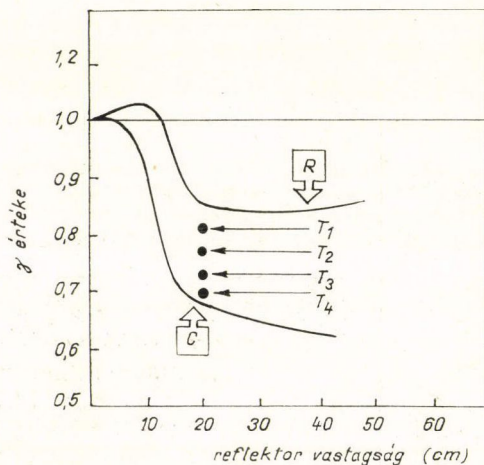


5.8—5.11 ábrák





5.12 ábra. Átmeneti forrás alakok

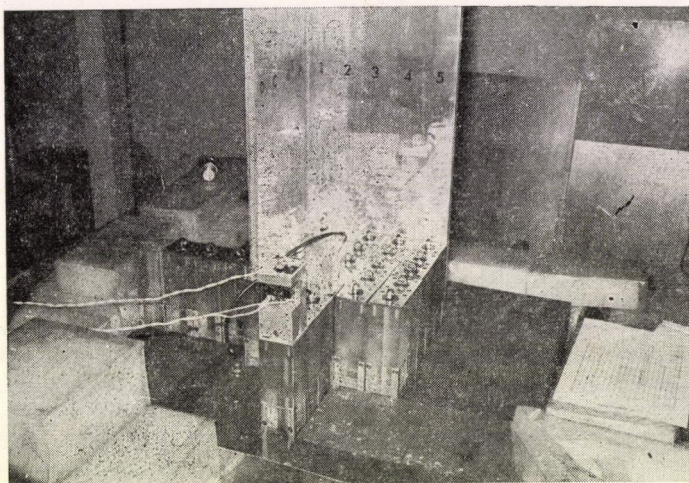
5.13 ábra.  $S_{3j}$  viselkedése C- és R-pulzus és az átmeneti forrásalakok mellett, a 20 cm grafitlalt reflektált rendszerben5.14 ábra. A Gozani reaktivitás levezetése során talált  $\gamma$  tényező függése a reflektor vastagságától C- és R-pulzus esetén

## 6. Kísérleti vizsgálatok

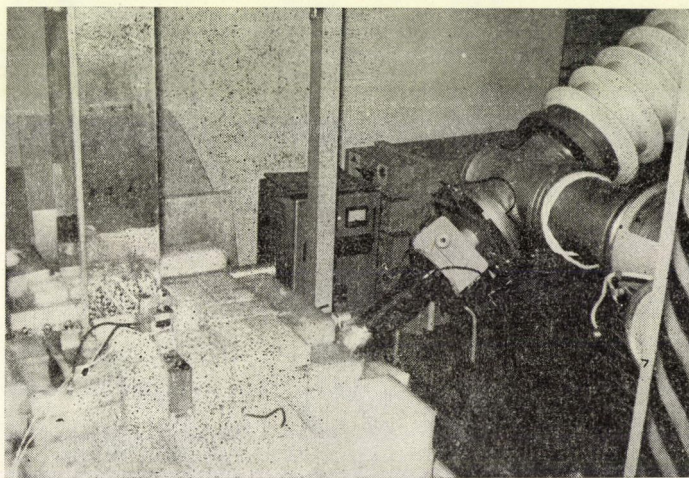
### 6.1 A berendezés leírása

#### ZR—4 Reaktor

A ZR—4 reaktor a KFKI-ban készült szilárd homogén zónájú, grafittal reflektált kritikus rendszer [45]. A zóna anyaga 20%-os dúsítású urán és polietilén keveréke. A por alakú  $U_3O_8$ -at polietilén porral összekeverve megolvasztás és préselés útján készültek a zónát alkotó blokkok. Egy-egy blokk mérete  $50 \times 50 \times 100$  mm. A könnyebb kezelhetőség érdekében 3—3 blokkot egy vékony alumínium keret fog össze.

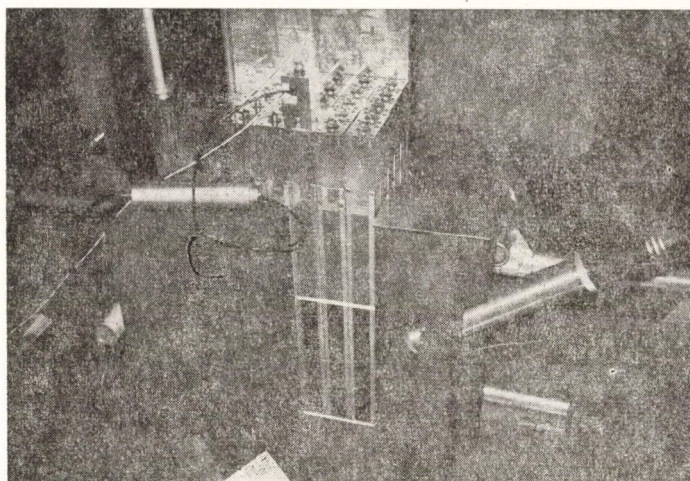


6.1a ábra

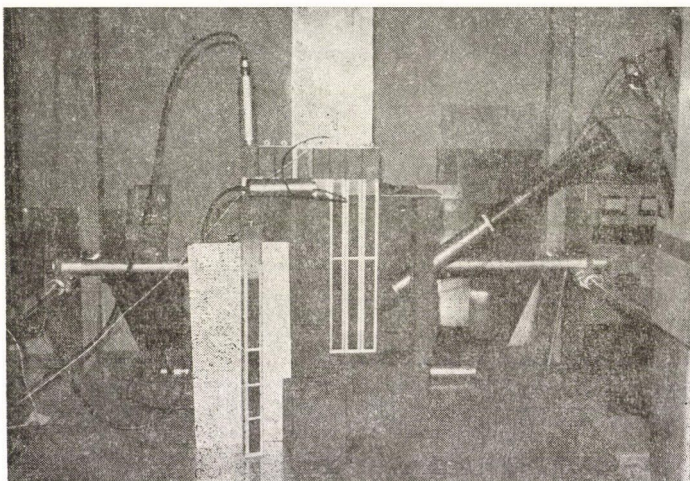


6.1b ábra





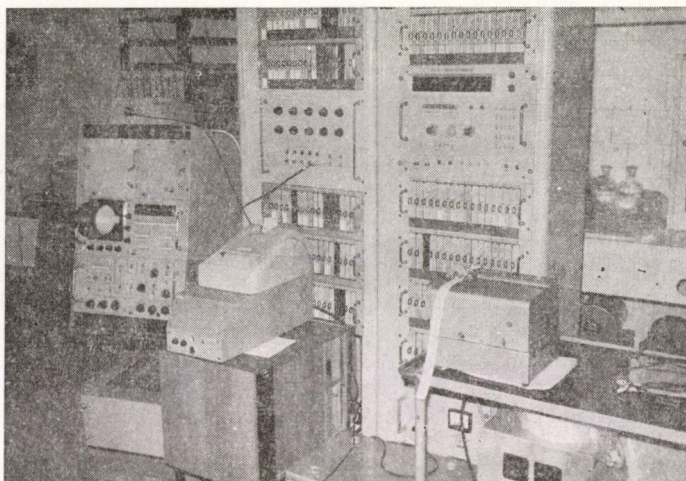
6.1c ábra



6.1d ábra

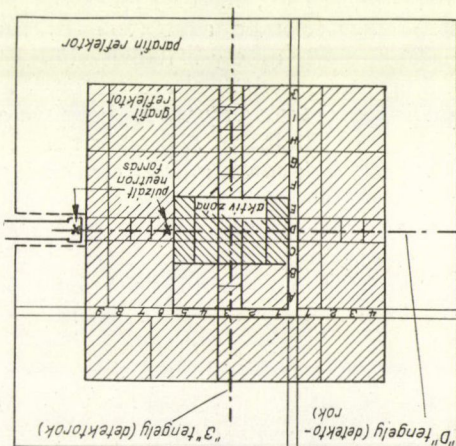
A grafit reflektor a következőképpen van megoldva. A reaktor alsó része egy 208 mm magasságú kb. négyzet alakú grafit lap, amely nagyobb hasábokból van összerakva. Ezen a grafit lapon áll középen a zóna, körben pedig ugyancsak nagyobb hasábokból egy 208 mm vastagságú négyzetes gyűrű, amely az oldalreflektort alkotja. A zónaelemekben, amelyek a már említett alumínium keretben 3—3 urán-polietilén blokkot tartalmaznak, felül egy-egy  $50 \times 50 \times 208$  mm-es grafit blokk is van, ez a felső reflektor. Egy-egy ilyen zónaelem felül horoggal van ellátva, és az egész egy egységként a zónából kiemelhető. Mintegy 25 db ugyanilyen kiképezésű, felül horoggal





6.1a—e ábrák. A ZR—4 reaktor a neutrongenerátorral és a mérésben használt elektronikus berendezések

ellátott keret végig grafitval van kitöltve, ezek az oldalreflektor tetszőleges helyén a nagyobb hasábok helyére tehetők. Az oldalreflektor olyan magas, hogy a teteje éppen egyvonalban van a zónaelemekben levő grafitblokkok tetejével. A kritikus töltethez 58 blokkra van szükség, ami 19 teljes és egy darab egy blokkot tartalmazó zónaelem  $5 \times 4$ -es elrendezésű behelyezésével érhető el. Ily módon (a 2 blokk hiányát leszámítva) a zóna méretei: magassága 300 mm, hosszúsága 260 mm, szélessége 208 mm. Az utóbbi két szám úgy jön ki, hogy az 50 mm-es blokkokat összetartó 1 mm-es alumínium keret miatt a zónaelemek modulmérete 52 mm. A rendszer minden vízszintes mérete ehhez a modulmérethez igazodik, hogy a különböző alakú zónák kialakításában minél nagyobb flexibilitás legyen élvezhető. Ennek köszönhető, hogy különböző méretű és alakú zónák, különböző geometriájú reflektorok szerelhetők össze. A nukleáris biztonság érdekében egyrészt még egy hidrogén tartalmú réteg (15 cm parafin) is körülveszi a rendszert, másrészt az egészet négy oldalról tetszés szerinti helyzetben rögzíthető csöke-  
ret fogja össze. Az előzőre azért van szükség, hogy a reflektor végtelennek tekinthető legyen, ellenkező esetben a reaktivitás szempontjából nem közömbös, ha kívülről bármiféle tárgyat helyezünk a rendszer mellé. A mechanikus összeszorítás azért kell, nehogy egy lazán összeállított rendszert kritikusá tegyenek, mert ha ezt ezután összebb szorítják az a reaktivitás növekedését, akár megszabadást is okozhat.



6.2 ábra. ZR—4 zónatérkép



A reaktor szabályozása a zóna és a grafit reflektor között, két szomszédos oldalon behelyezhető kadmium lemezekkel történik. Ezt a szabályozást az teszi lehetővé, hogy a rendszerben a reflektor értékessége nagyon nagy. Másrésztől megvan az az előnye, hogy ezáltal a zónában belül semmilyen perturbáló szerkezet nincs. A kadmium lemezek 16 mm vastag (kb. 1/4 modul), L alakban elhelyezkedő alul és felül rögzített merev tokban foglalnak helyet. Négy ilyen lemez van: két keskenyebb, ezek a szabályozó lemezek, és két szélesebb, ezek a biztonságvédelmi lemezek, amelyek a szabályozó rendszerben detektált vészjel esetén alsó véghelyzetükbe esnek. A lemezek mozgatása a rendszer felett elhelyezett szervomotorokkal a vezénylőpultról történik. A vezénylőpult külön vezénylő helyiségben van, ezért maga a reaktor biológiai védelemmel nincsen körülvéve. A szabályozó rendszerhez tartozó üzemi detektorok a zóna alatt, az alsó parafin reflektorban vannak elhelyezve. A reaktor felépítése a 6.1 fényképeken, illetőleg a 6.2 vízszintes metszeten látható. Tekintve, hogy a kísérletsorozat során a reaktor függőleges felépítését nem változtattuk, az összes vizsgált konfiguráció jól reprezentálható a megfelelő vízszintes metszet, azaz zónatérkép segítségével.

### *Neutrongenerátor és mérőberendezés*

A kísérletekben használt neutrongenerátor a KFKI-ban készült NIG—200 [46] volt. Ez egy hagyományos, (D, T) reakciót felhasználó berendezés. A nagyfeszültséget egy speciális, ún. osztott vasmagú transzformátor szolgáltatja.

A neutronimpulzus szélessége és ismétlődési ideje folyamatosan állítható. A mérésekben rendszerint 50—100  $\mu$ sec impulzus szélességet és 15—33 msec ismétlődési időt használtunk. A ciklus kezdetét jelentő start-jelet a targetáramról vettük le.

A kísérletek céljára mérődetektorokat kellett elhelyezni a zóna és a reflektor különböző helyein. SzNM—12 típusú, bóros koronakisülési csöveket használtunk. Ezek 11 mm átmérőjűek és 21 cm hosszúak. Monitor detektorként egy valamivel nagyobb méretű 20th Century Electronics BF<sub>3</sub> csövet használtunk. A mérődetektorokat zónaelemek, illetőleg reflektorelemek belsejében helyeztük el. 2 zónaelembe és 2 reflektorelembe az 5×5 cm-es keresztmetszet közepén áthaladó függőleges lyukat fűrtünk, amely a fűtőelemblokkok esetében alumínium csővel volt bélelve. Ezekben helyezkedtek el a detektorok a zóna vízszintes középsíkjára szimmetrikusan. A detektorok úgy voltak beépítve a zónaelemekbe, hogy az egész egy egységként legyen kezelhető. A detektort tartalmazó zónaelemeket mérőelemeknek neveztük. A mérések során csak az egyik zónamérőelemet használtuk, ezt vándoroltattuk a zóna különböző pozícióiban, mindig helyet cserélve az éppen ott levő közönséges zónaelemmel. Ugyanígy jártunk el az egyik reflektormérőelemmel is, míg a másik a monitor detektor szerepét játszva állandóan azonos pozícióban volt.

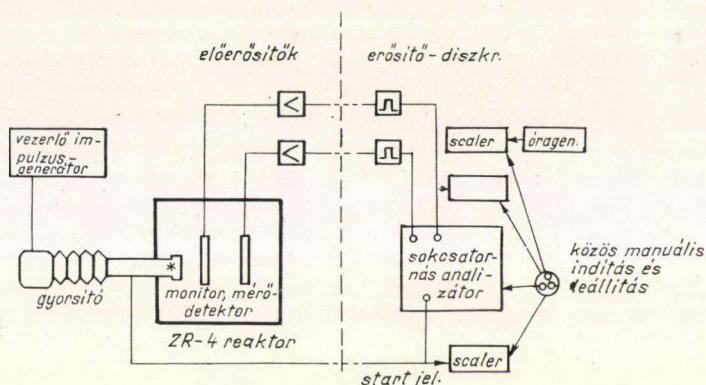
A zónában vándorló mérőelem a benne levő detektor miatt természetesen a pozíciótól függő perturbációt jelent a rendszerben. Ezt korrekcióval vettük figyelembe.

A mérőláncok felépítését a 6.3 ábrán is láthatjuk.

A detektorhoz közel, a zóna mellett helyezkedtek el az NV—247 típusú előerősítők, míg az erősítő-diszkriminátorok (NK—213/A) és a nagyfeszültségű tápegységek a mérőszobában voltak. A rendszer pulzusválaszának felvétele NTA—512 típusú 512 csatornás analízátorral történt, multiscaler üzemmódban, egy speciális mérő-



fiók — Time Distribution Measuring Unit (NZ—611) — felhasználásával. Ez a plug-in egyszerre 4 detektor jeleinek párhuzamos analizálását teszi lehetővé, de mi csak két láncot használtunk: a mindenkor mérődetektort és a monitor detektort. Mindkettőről minden esetben analizáltuk és kiértékeljük a pulzusválaszt. A mérések során 50—100  $\mu$ sec csatornaszélességet használtunk, az egy-egy detektorhoz rendelt csatornaszám 128 volt.



6.3 ábra. A pulzált mérések blokkvázlata

A csatornatarthalmakat lyukszalagon hoztuk ki, az így kapott lyukszalagot még néhány vezérlőadattal kellett kiegészíteni, hogy számológépes kiértékelésre alkalmas legyen. Ezeket részben a mérési idő és a ciklusszám scalerekkel történő egyidejű méréséből kaptuk.

A válaszgörbe kiértékelésére legkisebb négyzetek módszerével történő exponenciális illesztést végeztünk az RVEX [47] program segítségével. Minden feladatban egy exponenciális plusz háttért és két exponenciális plusz háttért illesztettünk. Az illesztett paraméterek végső értékét úgy választottuk ki, hogy tanulmányoztuk ezek viselkedését a kezdőcsatorna függvényében. Erről még részletesebben lesz szó a 6.2 pontban. Esetenként 18-szor végeztük el az illesztést, a kezdőcsatorna először a 2-ik, utoljára a 80-ik volt.

Az illesztőprogramot kiegészítettük a Sjöstrand és Gozani reaktivitások kiszámításával, úgy hogy ezeket az értékeket közvetlenül megkaptuk.

A következő pontban részletesebben vizsgáljuk azokat a problémákat, amelyekkel a kísérletek elvégzése, illetőleg kiértékelése során szembekerültünk. Kitérünk a mért és számított mennyiségek összehasonlíthatóságának problémájára, a detektorok reaktivitás perturbáló hatására és a legjobb illesztés kiválasztására.

## 6.2 A mérések elvi és technikai problémái

### A mérés útján meghatározható mennyiségek

Az elméleti eredmények tárgyalásánál egyetlen,  $\delta$ -függvénnyel idealizált forrás válaszgörbéjét vizsgáltuk, pedig a kísérletekben periódikusan ismétlődő pulzálást alkalmazunk, és egy-egy pulzus szélessége sem szükségképpen olyan kicsi, hogy a pulzus időbeli lefutását  $\delta$ -függvénnyel lehetne közelíteni. A kísérleti fizikusok sok-



szor bizalmatlanok a miénkhez hasonló egyszerűsítő feltevések mellett levezetett elméleti eredményekkel szemben. Részben [34]-re támaszkodva megmutatjuk, hogy az elméleti részben követett egyszerűbb tárgyalásmód a kísérletileg hozzáférhető bonyolultabb esettel ekvivalens. Rámutatunk arra is, hogy az ekvivalencia ellenére a mérések gyakorlati kivitelezésében nem közvetlenül az elméleti levezetésben szereplő mennyiségeket mérjük, de ezek a mért mennyiségekből könnyen megkaphatók. A helyes mérésértékelő formulákat ezen ismeretek birtokában írjuk fel.

Jelöljük  $\varphi^\delta(t)$ -vel a rendszer válaszát ha a forrás egyetlen  $\delta$ -függvény volt:  $\delta(t)$ . Feltesszük, hogy  $\varphi^\delta(t)$  exponenciális időfüggésű tagokból tevődik össze:

$$\varphi^\delta(t) = \sum_n a_n e^{\alpha_n t}, \quad (6.1)$$

(Itt  $a_n$  természetesen az összes többi koordináta függvénye, de most — a mérés elvégzését tartva szem előtt — úgy gondoljuk, hogy  $\varphi^\delta(t)$  adott helyen levő detektor által mért válasz, ami azt jelenti, hogy a helykoordináta mint rögzített paraméter szerepel, a sebesség vagy ugyanúgy, vagy valamilyen detektor-súlyfüggvénnyel ki van integrálva. Számunkra  $a_n$  konstans, mert most a válaszfüggvénynek csak az időfüggésével foglalkozunk.)

Ahelyett, hogy  $\varphi^\delta(t)$ -val foglalkoznánk, tekintsük (6.1) egyetlen tagját,  $\varphi_n^\delta(t)$ -t. ( $\varphi_n^\delta(t) = a_n e^{\alpha_n t}$ ). Legyen  $A_n^{\delta(\text{sing})}$  az  $n$ -ik módus időintegrálja, egyetlen,  $\delta$ -függvény alakú pulzus esetén:

$$A_n^{\delta(\text{sing})} = \int_0^\infty a_n e^{\alpha_n t} dt = -\frac{a_n}{\alpha_n}. \quad (6.2)$$

Tekintsünk periodikus  $\delta$ -függvény forrást, vagyis a következőt

$$\delta(t) + \delta(t-T) + \dots + \delta(t-iT) + \dots, \quad (6.3)$$

ahol  $T=1/R$  a pulzus ismétlődési idő. A válaszgörbét a periodikus esetben jelöljük  $\Phi^\delta(t)$ -vel.

$$\Phi_n^\delta(t) = \sum_{i=0}^\infty \varphi_n^\delta(t+iT) = \frac{a_n e^{\alpha_n t}}{1 - e^{\alpha_n T}}; \quad 0 < t < T. \quad (6.4)$$

A megfelelő időintegrál vagyis terület pedig

$$A_n^{\delta(\text{rep})} = \int_0^T \Phi_n^\delta(t) dt = -\frac{a_n}{\alpha_n}, \quad (6.5)$$

ami pontosan azonos (6.2)-vel, az egyetlen  $\delta$ -pulzusnak megfelelő területtel. Teljesen mindegy tehát, hogy periodikusan ismétlődő  $\delta$ -függvény pulzálást tekintünk, és a  $(0, T)$  intervallumon képezzük az időintegrálokat, vagy egyetlen pulzust tekintünk, és 0-tól  $\infty$ -ig integrálunk.

Tekintsünk most időben véges kiterjedésű neutronimpulzust:

$$S(t) = \begin{cases} 0 & \text{ha } t < 0 \\ S & \text{ha } 0 < t < d \\ 0 & \text{ha } t > d. \end{cases} \quad (6.6)$$

A (6.6)-tal adott forrás esetén egyetlen pulzusra adott választ jelöljük  $\varphi^{sq}(t)$ -vel, a periodikus forrásra adott választ pedig  $\Phi^{sq}(t)$ -vel. Ismét csak egyetlen exponenciális módust vizsgálunk, vagyis  $\varphi_n^{sq}(t)$ -t, illetve  $\Phi_n^{sq}(t)$ -t.  $\varphi_n^{sq}(t)$ -t így kapjuk

$$\varphi_n^{sq}(t) = \int_0^t \varphi_n^\delta(t-\tau) d\tau, \quad (6.7)$$

ahonnet (6.6)-tal kapjuk, hogy

$$\varphi_n^{sq}(t) = \begin{cases} \frac{S\alpha_n}{\alpha_n} (e^{\alpha_n t} - 1) & \text{ha } 0 < t < d \\ \frac{S\alpha_n}{\alpha_n} (1 - e^{-\alpha_n d}) e^{\alpha_n t} & \text{ha } t > d. \end{cases} \quad (6.8)$$

Az ennek megfelelő területet úgy kapjuk, hogy ezt integráljuk 0-tól  $\infty$ -ig, két részben, a (6.8)-ban szereplő szétválasztás figyelembevételével. Az eredmény

$$A_n^{sq(\text{sing})} = -Sd \frac{\alpha_n}{\alpha_n} \quad (6.9)$$

(6.5) és (6.9) összevetéséből látszik, hogy a véges pulzus hatására a megfelelő terület  $Sd$ -vel szorozódik. Minthogy azonban  $Sd$  nem függ  $n$ -től, bármely terület-hányadosnál ez a szorzó kiesik, vagyis a terület-hányadosok szempontjából (6.6) négyszög impulzus a  $\delta$ -pulzussal ekvivalens.

A teljesség kedvéért nézzük meg a periodikus négyszög-pulzálás esetét. A válaszfüggvényt,  $\Phi_n^{sq}(t)$ -t a következőképpen kapjuk

$$\Phi_n^{sq}(t) = \sum_{i=0}^{\infty} \varphi_n^{sq}(t + iT). \quad (6.10)$$

Itt figyelembe kell venni, hogy míg  $t > d$  esetén (6.10) valamennyi tagjában (6.8)  $t > d$ -re vonatkozó kifejezése áll, addig  $0 < t < d$  esetén az  $i=0$  tagban (6.8)-ból a  $0 < t < d$ -re vonatkozót kell használni, ezért — a  $G = S\alpha_n/\alpha_n$  és az  $\alpha = \alpha_n$  egyszerűsítő jelöléseket használva —  $\Phi_n^{sq}(t)$ -t is két kifejezés adja:

$$\Phi_n^{sq}(t) = \begin{cases} G(1 - e^{-\alpha d}) \frac{e^{\alpha t}}{1 - e^{\alpha T}} + G(e^{\alpha t} - 1) - G(1 - e^{-\alpha d}) e^{\alpha t}, & \text{ha } 0 < t < d \\ G(1 - e^{-\alpha d}) \frac{e^{\alpha t}}{1 - e^{\alpha T}}, & \text{ha } t > d. \end{cases} \quad (6.11)$$

Az időintegrál megfelelő módusát ebből  $(0, T)$ -re való integrálással kapjuk, amit ismét két részben tudunk elvégezni. A két integrál összegeként

$$A_n^{sq(\text{rep})} = -Sd \frac{\alpha_n}{\alpha_n} \quad (6.12)$$

adódik, vagyis négyszög pulzus esetén is mindegy, hogy egyszeri vagy periodikus pulzálást tekintünk, ha a megfelelő tartomány felett képezzük az időintegrálokat.



Némi óvatosságra mégis szükség van, mert a gyakorlatban a mérések kiértékelése nem egészen az eddig feltételezett módon történik. Tekintsük először a periodikus pulzálás következményeit, majd a gyakorlatban alkalmazott véges szélességű négyszög-pulzus következményeit.

Az előbb beláttuk, hogy a kétféle megközelítés, az egyszeri vagy periodikus pulzálás ekvivalens. Nézzük, hogy járunk el a gyakorlatban a késő terület meghatározásánál. Egzaktul

$$\varphi_d = \sum_n a_{n(d)} e^{\alpha_{n(d)} t} \quad (6.13)$$

és

$$A_d^{(\text{sing})} = - \sum_n \frac{a_{n(d)}}{\alpha_{n(d)}}. \quad (6.14)$$

Mint korábban, feltesszük, hogy

$$A_d \approx A_d^{(0)}, \quad (6.15)$$

vagyis

$$A_d^{(\text{sing})} = - \frac{a_{0(d)}}{\alpha_{0(d)}}. \quad (6.16)$$

Ha az  $A_d^{(\text{rep})}$  mennyiséget úgy határoznánk meg a mérésből, mint (6.5), akkor a levezetés alapján

$$A_d^{(\text{rep})} = A_d^{(\text{sing})}$$

automatikusan következne. (A terület-hányadosokra pedig fennállna az egyenlőség akár  $\delta$ -, akár négyszög-pulzust alkalmazunk.)

A mérési gyakorlatban azt tételezzük fel ezzel szemben, hogy  $\Phi_d^{\text{rep}} = B = (\text{const.})$ , a területet pedig

$$A_d^{(\text{rep})} = B \cdot T \quad (6.17)$$

alapján kapjuk. (6.15) feltételezése mellett számítsuk ki a következő mennyiséget

$$\Delta = |\Phi_d^{(0)\text{rep}}(t=0) - \Phi_d^{(0)\text{rep}}(t=T)|.$$

$\Delta$  a  $(0, T)$  tartományon az integrálandó függvény változása. (6.4) segítségével kapjuk, hogy  $\Delta = a_{0(d)}$ , és a függvény relatív változása

$$\varepsilon \equiv \frac{\Delta}{\Phi_d^{(0)\text{rep}}} = 1 - e^{\alpha_{0(d)} T} \approx \alpha_{0(d)} T. \quad (6.18)$$

Ha  $\alpha_{0(d)} \approx 0,1 \text{ sec}^{-1}$ ,  $T = 0,1 - 0,01 \text{ sec}$ ,  $\varepsilon < 1\%$  adódik. Ilyen esetben megengedhető a (6.17) szerinti konstans késő-neutron háttér feltételezés.

A válaszfüggvény prompt részét a periodikus pulzálás nem érinti, mert rendszerint

$$e^{\alpha_{0(p)} T} \ll 1,$$

ami miatt

$$\Phi_p = \varphi_p. \quad (6.19)$$

A (6.12)-vel kifejezett arányosság a  $\delta$ -pulzus területek és a négyszög-pulzus területek között abban az esetben érvényes, ha a  $\Phi_n^{sq}(t)$ -t a (6.11)-gyel megadott alakban integráljuk. Végeredményét tekintve ez történik akkor, amikor a Sjöstrand mód-

szer számára a csatornatartalmakat összegezzük, és így kapjuk a prompt területet; vagy amikor a késő területet (6.17) szerint közelítjük. Más a helyzet a Gozani módszer számára meghatározott prompt alapmódussal.

A mért görbére

$$\tilde{A}e^{\alpha_0(p)} + \tilde{B} \quad (6.20)$$

alakú függvényt illesztünk, de a görbe elejéről elhagyjuk az illesztésből azokat a pontokat, amelyekben a magasabb harmonikusok hatása érződik. Ezzel együtt elhagyjuk  $\Phi_p^{(0)}$ -ból a véges pulzus hatására létrejövő kezdeti, felfutó részt is, mert a várakozási idő biztosan nagyobb, mint a pulzus  $d$  szélessége. Figyelembe véve (6.19)-et, (6.8)-ból kapjuk  $\tilde{A}$ -t

$$\tilde{A} = \frac{Sa_0(p)}{\alpha_0(p)} (1 - e^{-\alpha_0(p)d}). \quad (6.21)$$

Vagyis a függvényt a csak  $t > d$ -re érvényes formulával helyettesítjük. Ha ezt  $(0, T)$  felett integráljuk, biztosan mást kapunk, mint (6.12). Ezért inkább a következőképpen járunk el. (6.12)-ből az is látszik, hogy

$$\tilde{B} = Sd \cdot B, \quad (6.22)$$

és így az illesztett  $\tilde{A}$ ,  $\tilde{B}$  és  $\alpha_{0(p)}$  paraméterekből

$$A_p^{(0)} = -\frac{a_{0(p)}}{\alpha_{0(p)}},$$

vagy inkább — a négyszög-pulzus miatt — ennek  $Sd$ -szerese kifejezhető:

$$SdA_p^{(0)} = \frac{\tilde{A}d}{e^{-\alpha_{0(p)}d} - 1}. \quad (6.23)$$

Ezt  $SdA_d = \tilde{B}T$ -vel használva

$$\$_{G0} \equiv \frac{A_p^{(0)}}{A_d} = \frac{\tilde{A}d}{(e^{-\alpha_{0(p)}d} - 1)\tilde{B}T}. \quad (6.24)$$

A mérések kiértékelésével kapcsolatban szót kell még ejteni arról, hogy a  $\Phi(t)$  válaszfüggvény felvétele sokcsatornás analizátorral történik, aminek következtében a közvetlenül mért  $y_i$  mennyiségek, a csatornák tartalma a következők:

$$y_i = \int_{t_{i-1}}^{t_i} \Phi(t) dt, \quad (6.25)$$

ahol  $i$  a csatornaszám index és  $t_{i-1}$ ,  $t_i$  az  $i$ -ik csatornaidő végpontjai. Amikor a különböző időintegrálokat ( $A_p$ ,  $A_d$ ,  $A_p^{(0)}$ ) előállítjuk, figyelembe kell venni, hogy a mért  $y_i$  sorozat már maga is időintegrálokból áll. Emiatt a totál terület a csatornatartalmak egyszerű összeadása útján nyerhető. (Négyszög-pulzus esetén így természetesen  $Sd \cdot A$ -t kapjuk.) A késő területet (illetve  $Sd \cdot A_d$ -t) a konstans késő-neutron háttér feltételezésével  $\tilde{B} \cdot T$  alakban várjuk, de az előbbieket értelmében, ha  $b$  azok-



nak a csatornatartalmaknak az átlaga, ahol már a prompt rész járuléka elhanyagolható, akkor

$$b = \tilde{B} \cdot \Delta t, \quad (6.26)$$

vagyis

$$Sd \cdot A_d = \frac{T}{\Delta t} b. \quad (6.27)$$

A prompt alapló módus leválasztása, és többnyire ezzel összefüggően a késő-neutron háttér megállapítása is a már említett módon

$$y = ae^{\alpha t} + b \quad (6.28)$$

alakú függvény illesztésével történik. Könnyű kiszámítani, hogy konstans  $\Delta t$  mellett ha  $\Phi(t)$  leírható volt az

$$\tilde{A}e^{\alpha t} + \tilde{B}$$

függvénnyel, akkor az  $y_i$  csatornatartalmakat az  $i$  index függvényében (minden  $t_i$ -re) (6.28) akkor írja le, ha

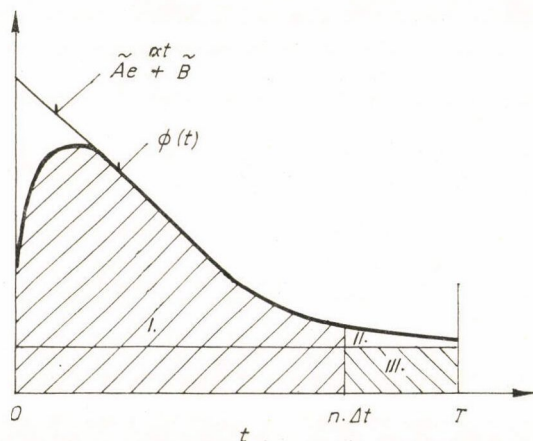
$$a = \tilde{A} \frac{1 - e^{-\alpha \Delta t}}{\alpha} \quad (6.29)$$

$$b = \tilde{B} \Delta t. \quad (6.30)$$

Emiatt a mérésekből elsődlegesen kapott  $a$ ,  $b$  és  $\alpha$  paraméterekkel a Gozani reaktivitás (6.24)-ből:

$$S_{G0} = \frac{\alpha \Delta t}{(1 - e^{-\alpha \Delta t})(e^{-\alpha d} - 1) b T} \quad (6.31)$$

A Sjöstrand reaktivitás meghatározása végül is a 6.4 ábrán látható módon a következőképpen történik: ha  $n$  az analizátor csatornáinak száma,  $\sum_{i=1}^n y_i$  adja az I.



6.4 ábra. Mért válaszgörbe. A kiértékelő formulák tárgyalásához

területet, amely a totál területnek azonban csak egy része. A II. területet az illesztett exponenciális függvény felhasználásával számítjuk ki, III. pedig a késő terület folytatása az analízis idő végétől az új pulzus belövésének idejéig. Végül is a totál terület, illetőleg  $Sd$ -szerese

$$SdA^{\text{tot}} = \sum_i y_i + b \left( \frac{T}{\Delta t} - n \right) + \frac{ae^{\alpha_n \Delta t} \left[ 1 - e^{\alpha \Delta t \left( \frac{T}{\Delta t} - n \right)} \right]}{e^{-\alpha \Delta t} - 1}. \quad (6.32)$$

A Sjöstrand reaktivitás pedig innen

$$\rho_{\text{SJ}} \equiv \frac{A_p}{A_d} = \frac{A^{\text{tot}} - A_d}{A_d} \quad (6.33)$$

(6.33) számításánál (6.27)-et használjuk és  $Sd$  természetesen kiesik. (Természetesen a pulzált mérést lehet úgy is csinálni, hogy  $T = n\Delta t$ , amikor a II. és III. terület zérus.)

#### *A méréskiértékelő program használata*

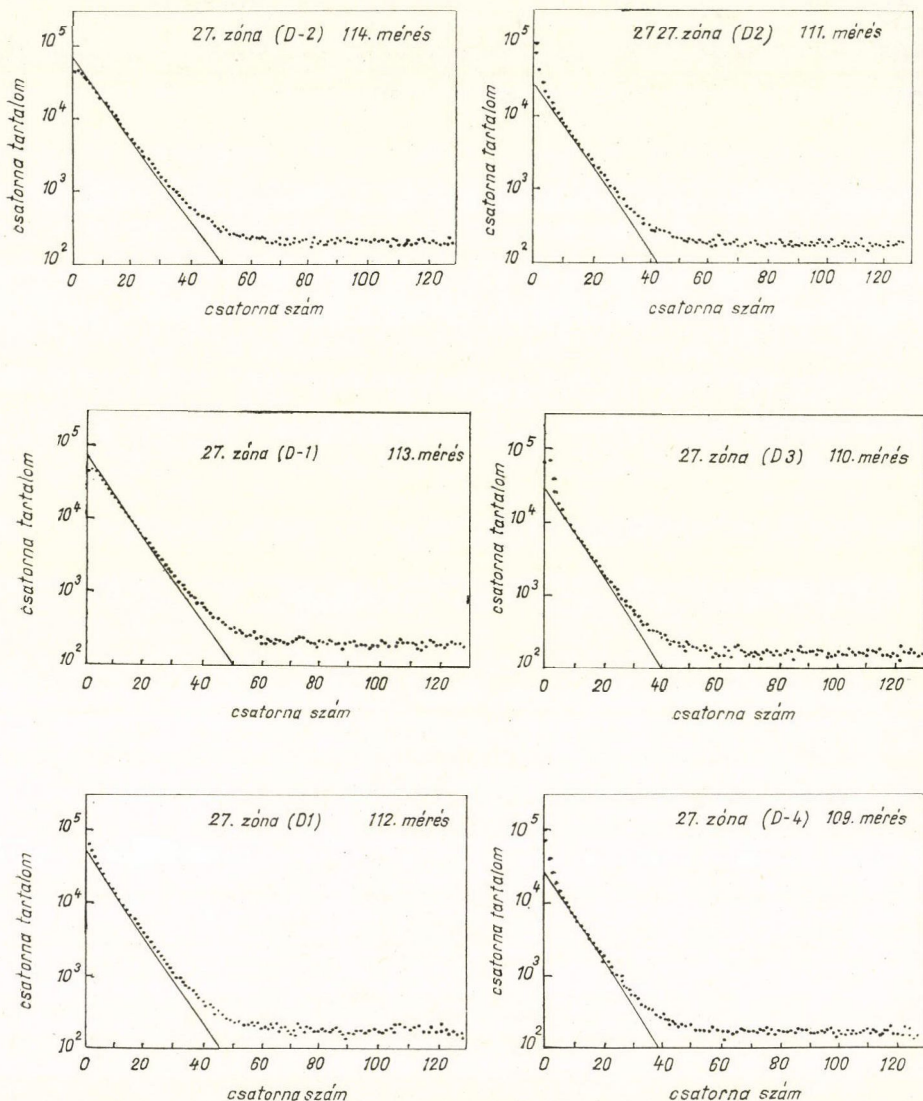
A RVEX méréskiértékelő program [47] segítségével történik az exponenciális függvény illesztése és a reaktivitások,  $\rho_{G0}$  és  $\rho_{\text{SJ}}$  meghatározására a (6.31), (6.32) és (6.33) képletek vannak beprogramozva. Az illesztés súlyozott legkisebb négyzetek módszerével történik. Az exponenciális függvény természetesen nem írja le a mért görbe első szakaszát, ezért a kezdőcsatorna változtatásával újra és újra elvégezzük az illesztést, és keressük azt a kezdőcsatornát, amelytől már jó illesztést kapunk. Ezt a műveletet léptetésnek nevezzük. Egy-egy illesztésből rendelkezésünkre áll a paraméterek értéke, ezek hibája és az illesztés jóságára jellemző  $\chi^2$  paraméter. A léptetés függvényében valamennyi paraméter viselkedését figyelembe véve, szubjektív választással döntöttük el, hogy melyik illesztést (melyik kezdőcsatornától) fogadjuk el. Megjegyezzük, hogy ehhez a választáshoz megfelelő algoritmust lehetett volna csinálni, ezt elsősorban azért nem tettük, mert a szubjektív választás közben sok olyan körülményt lehetett figyelembe venni, amelyek a mérés végeredményét befolyásolják, mint egyes, láthatóan rossz pontok figyelmen kívül hagyása, a két exponenciális plusz háttér illesztés eredménye, vagy az a körülmény, hogy azonos zóna különböző pontjaiban a bomlási állandónak elvileg azonosnak kell lennie. Ezeknek a körülményeknek a figyelembevétele egy algoritmusban az egészet nagyon elkomplikálta volna, bár ilyet lehet és szokás is csinálni. Ilyen jellegű illesztőprogram [48] eredményeivel néhány mérési eredményünket összevetve gyakorlatilag egybecsést tapasztaltunk.

A 6.5a—f. ábrákon a közvetlenül mért csatornatartalmakat rajzoltuk fel. Jól megfigyelhető, hogy a reaktor különböző helyein mért görbék lényegében azonos meredekségű prompt fundamentális bomlást mutatnak, de a görbék elején a prompt felharmonikus tartalom a detektor helyétől függően eltérő jellegű.

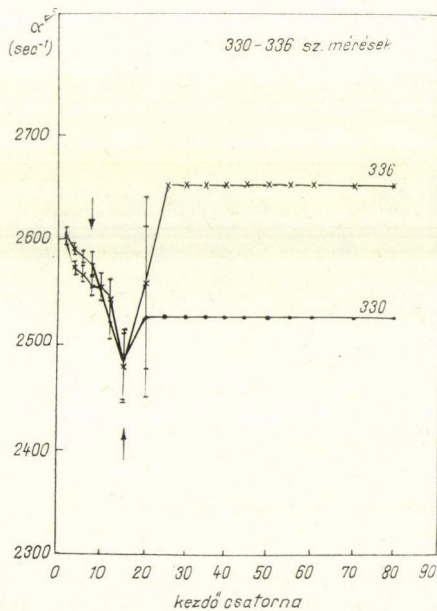
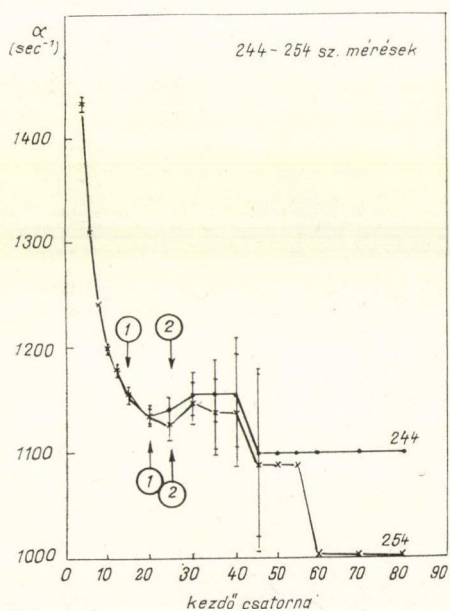
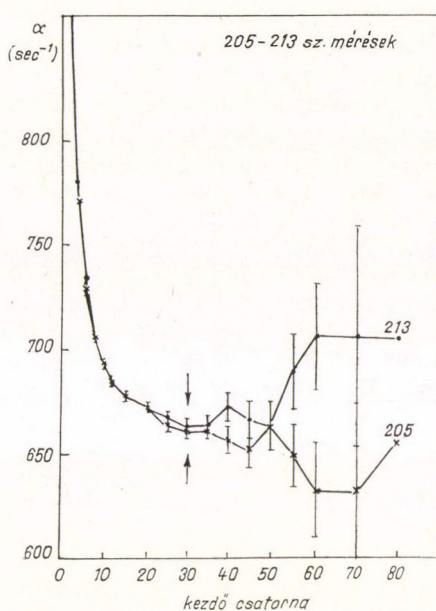
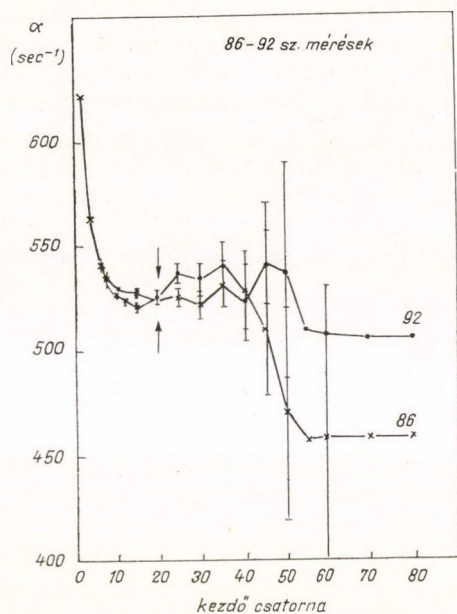
Az  $\alpha$  paraméter és ennek  $\Delta\alpha$  hibája a léptetés függvényében (a kezdőcsatorna függvényében) a 6.6a—d. ábrákon feltüntetett módon viselkedik. Ezeket az ábrákat az említett legjobb illesztés kiválasztásának illusztrálására mutatjuk be. Általánosságban azt lehet mondani, hogy jó mérés az, amelyben a paraméterek értéke egy bizonyos kezdőcsatorna tartományban stabilizálódik, jelöljük annak, hogy „rajta vagyunk”



a fundamentális exponenciálison. Ha ez így van, mint a 205/213 sz. méréseknél (6.6b ábra), akkor a legjobb illesztés kiválasztása egyszerű és magától értetődő. Ha nem így van, mint a 330/336 sz. méréseknél (6.6d. ábra), akkor bizony a legjobb algoritmussal sem lehet megfelelő paraméter becslést kapni. Lényeges azonban, hogy szubjektív választás esetén ez a körülmény automatikusan a kiértékelő tudomására jut, ha viszont az automatikus algoritmus végzi a kiválasztást is, akkor esetleg ez nem derül ki.



6.5a—f. ábrák. Jellegzetes bomlásgörbék. 27. zóna, D tengely mentén. ( $\Delta t = 200 \mu\text{sec}$ )



6.6a-d. ábrák. Az  $\alpha$  időállandó viselkedése a léptetés (kezdőcsatorna) függvényében. (Nyíl jelöli a kiválasztott legjobb illesztést.)



Nem egy esetben, amikor ilyen jellegű viselkedést tapasztaltunk, a kérdéses mérést jobban megnézve hibás lyukasztást, vagy más kezelési hibát fedeztünk fel, aminek a kijavítása után minden rendbejött. A négy ábrán azonos körülmények között megismételt méréspárok eredményét láthatjuk. Ezek segítségével a mérések reprodukálhatóságát tanulmányoztuk, a görbékről levonható következtetéseket a mérési hibákról és reprodukálhatóságról szóló részben tárgyaljuk.

#### *A detektorok reaktivitás perturbáló hatása*

A mérések célja egy-egy rögzített szubkritikus reaktorállapotban a reaktivitás megmérése a zóna, illetőleg a reflektor különböző pontjaiban elhelyezett detektorok segítségével, vagyis a mérések helyfüggésének tanulmányozása. Megnehezíti ezt az a körülmény, hogy a detektor behelyezése a zónába jelentősen megváltoztatja a rendszer reaktivitását. A detektorokat csak úgy lehetett elhelyezni, hogy egy zónaelemben végighaladó függőleges lyukba tettük a detektort, és az így kialakított mérőelemet rendre felcseréltük a zóna többi elemével, egy-egy tengely menetén, vagy éppenséggel végig minden pozícióban. A mérőelem különböző helyeken különböző értékességű, ezért ezek a mérések mind a rendszer kismértékben eltérő reaktivitás állapotaiban történnek, ahelyett, hogy pontosan ugyanazt az állapotot mérnénk a különböző helyeken levő detektorokkal.

Ezt a hibát korrekcióval lehet figyelembe venni. A korrekció lényege, hogy a rendszer reaktivitásának változását a vándorló mérődetektoron kívül egy állandóan azonos helyen levő monitor detektorral is mérjük. Felmerül a kérdés, milyen módszerrel mérjük a reaktivitást a monitor detektorral. Eredetileg az  $1/N$  módszert gondoltuk a legcélravezetőbbnek, mert a korrekcióhoz csak relatív mérésre van szükség. Legyen a rendszer reaktivitása mérődetektor nélkül  $\varrho_0$ . Ekkor a monitor detektorral, behelyezett forrás mellett  $N_0$  beütésszámot mérünk. Ha az  $i$ -ik pozícióba behelyezzük a mérődetektort (az ott levő elemet kicseréljük a mérőelemre) a rendszer reaktivitása megváltozik,  $\varrho_i$  lesz. Ebben az állapotban a monitor detektorral  $N_i$ -t mérünk.

$$\begin{aligned}\frac{1}{N_0} &\sim \Delta k_0 \\ \frac{1}{N_i} &\sim \Delta k_i.\end{aligned}\tag{6.34}$$

A korrekciótól azt várjuk, hogy a mért  $\varrho_i$ -ből a helyes  $\varrho_0$ -t megkapjuk

$$\varrho_i \cdot \frac{N_i}{N_0} = \frac{\Delta k_i}{k_i} \frac{\Delta k_0}{\Delta k_i} = \frac{\Delta k_0}{k_i} \approx \frac{\Delta k_0}{k_0} = \varrho_0.\tag{6.35}$$

A kritikustól távolodva ez a módszer egyre kevésbé tűnt használhatónak, a forrás-detektor-perturbáció térfüggés miatt a mért  $N_i$ ,  $N_0$  értékek sok esetben nem mutatták azt a kvalitatív képet, amit várni lehetett: hogy a detektor perturbáló hatása a zóna közepén a legnagyobb, a széle felé kisebb és a reflektorban elhanyagolható. Ezért áttértünk a monitor detektor esetében is a pulzált módszerre. Mérőberendezésünk lehetővé tette, hogy a két detektor jeleit egyidőben feldolgozzuk. Nyilvánvaló azonban, hogy a pulzált reaktivitásmérés térfüggése miatt (ami a vizsgálatok

tárgya) egy távoli reflektor pozícióban levő monitor detektor (mint esetünkben) nem adja a reaktivitás helyes értékét. A következő eljárást alkalmaztuk.

Legyen a detektor nélküli rendszer reaktivitása  $\varrho$ . Egy zérus értékességű detektorral sem mérnénk azonban pontosan  $\varrho$ -t, a pulzált mérés térfüggő szisztematikus hibája miatt; hanem ha ez a detektor az  $x_i$  pozícióban van, a mért reaktivitás legyen  $\varrho(x_i)$ . Vizsgálatainkban éppenséggel a  $\varrho(x_i)$  görbéket akarjuk felvenni. Az  $x_i$  helyre behelyezett detektor  $\Delta\varrho_i$  értékességével megváltoztatja a rendszer reaktivitását, amely ekkor

$$\varrho_i = \varrho + \Delta\varrho_i \quad (6.36)$$

lesz. A detektor nélküli (tiszt) állapotot csak az  $x_M$  helyen levő monitor detektorral tudjuk mérni, a mérés eredménye  $\varrho(x_M)$ . A mérődetektorral perturbált állapotot mindkét detektorral mérjük: az  $x_i$  helyen levő mérődetektor  $\varrho_i(x_i)$ -t ad, a monitor detektor  $\varrho_i(x_M)$ -et. A reaktivitásmérés térfüggéséről tételezzük fel, hogy

$$\varrho(x) = k(x) \cdot \varrho, \quad (6.37)$$

ahol  $k(x)$   $\varrho$  kis változásaira nem érzékeny, vagyis

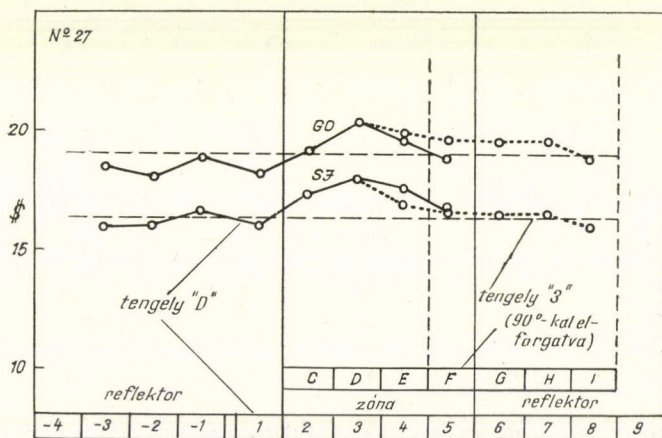
$$\varrho_i(x) = k(x)[\varrho + \Delta\varrho_i]. \quad (6.38)$$

Mindezek felhasználásával kapjuk, hogy

$$\frac{\Delta\varrho_i}{\varrho} = \frac{\Delta\varrho(x_M)}{\varrho(x_M)}, \quad (6.39)$$

ahol  $\Delta\varrho_i(x) = \varrho_i(x) - \varrho(x)$ .  $\varrho(x_i)$  pedig így fejezhető ki

$$\varrho(x_i) = \frac{\varrho_i(x_i)}{1 + \frac{\Delta\varrho_i(x_M)}{\varrho(x_M)}}. \quad (6.40)$$



6.7 ábra. A monitor detektorral mért reaktivitások a detektor-korrekcio elvégzéséhez



A 6.7 ábrán illusztrációképpen bemutatjuk a (6.40) szerinti korrekcióhoz szükséges  $\Delta q_i(x_M)/q(x_M)$  mérést.  $q(x_M)$  méréséhez felhasználjuk mindazokat az eseteket, amikor a mérődetektor legalább 1 elem távolságra van az aktív zónától. A reflektor vastagságától függően több ilyen mérés is van (két tengely mentén mérünk általában), ezek átlagos eredménye, ahogy az ábrán szaggatott vízszintes vonal jelzi, a perturbálatlan reaktivitás  $x_M$ -ben mérve:  $q(x_M)$ . Az ettől való  $\Delta q_i(x_M)$  eltérés görbáját a kvalitatíve várható, középen maximummal rendelkező görbe alapján „simítottuk” és azután olvastuk le a  $\Delta q_i(x_i)$  értékeket. A 6.7 ábrán látható görbék a 27. sz. zóna konfiguráció két tengelyére („D” és „3”) vonatkoznak. A korrekció nagysága a zónában átlagosan 10 % alatt volt.

### *Mérési hiba, reprodukálás*

Ilyen méréseknél meglehetősen bonyolult a mérési hiba megadása. A legfőbb hibaforrások a következők.

1. A Sjöstrand és Gozani módszerek szisztematikus hibája (l. térfüggés,  $\gamma$ ). Ez éppen az, amivel jelenleg foglalkozunk, úgyhogy itt nem tekintjük mérési hibának, jöllehet normális esetben, amikor egyszerűen reaktivitást akarunk mérni, ez a mérési hiba legfőbb járuléka.
2. Egyéb szisztematikus hibák. Itt elsősorban a detektorok által előidézett perturbációról lehet szó. Ennek korrigálása az előzőekben ismertetett módon kielégítőnek látszik.
3. Statisztikus hibák. Ezek elsősorban az analízis számlálás jellegéből adódnak. Más, ugyancsak statisztikus hibák forrása a berendezés különféle instabilitásai, külső (pl. elektromos) zavarok vagy azok a kismértékű zónaváltozások, amelyek a mérőelem állandó helycserélései következtében a nem szigorúan pontosan illeszkedő elemek miatt jönnek létre.

Ilyen körülmények között a mérési hibára jellemzőbb az egyes mérések reprodukálódása azonos körülmények között történő megismételt mérés által. 10 esetben végeztünk ilyen ismétlést. Azért nem ismételtünk meg minden mérést, mert a korlátozott mérési időt inkább egy-egy görbe több pontban való kimérésére fordítottuk. (Összesen 354 mérést végeztünk.) A 10 megismételt mérés néhány eredményét a 6.1 táblázatban láthatjuk. Ezek között két esetben a reprodukálás 4%-nál rosszabb volt: a 244/254 sz. és a 330/336 sz. méréseknél. A 6.6 ábrákon az  $\alpha$  paraméter léptetés szerinti beállítását láthatjuk négy megismételt mérés esetében. A 244/254 sz. mérésekről látható, hogy a mérések elég megbízhatóak, a paraméter rendesen beáll, de az eredetileg választott (1) legjobb illesztés a szubjektív megítélés hibája miatt eltérő eredményeket adott. A görbék alaposabb tanulmányozása után ezt ki lehetett javítani. Más a helyzet a 330/336 sz. méréseknél (6.6d ábra). Itt is feltűnően jól reprodukálódik a beállási görbe, mégis rossznak találtuk a paraméter reprodukálódását, egyszerűen amiatt, hogy a mérések valamilyen okból nem adnak egyértelműen beálló paramétert, és így nem lehet kiválasztani a legjobb illesztést. Szerencsére ilyen eset csak elvétve fordult elő. Jellemzőbb a mérések jó reprodukálódására a 6.6a és b ábrákon látható 86/92 sz. és 205/213 sz. mérések viselkedése. A mérések megismétlése általában 3–30 órával az első mérés után történt, közben más mérések voltak.

A legkisebb négyzetek módszerével történő illesztés során a mért pontok szórása és a mért görbe esetleges eltérő viselkedése az illesztendő függvényről a para-

## 6.1 TÁBLÁZAT

Kétszer elvégzett mérések néhány eredménye, a reprodukálás tanulmányozásához

1.	2.	3.	4.	5.	6.	7.	8.		9.	10.	
Mé- rés szá- ma	Kezdő csa- torna	B	A	$\alpha$	$\Delta\alpha$	$\varrho_{G0}$	%	$\varrho_{SJ}$	%	$\Delta\varrho_{G0}(\%)$	$\Delta\varrho_{SJ}(\%)$
86	20	340,18	29 723,73	526,87	3,46	5,06	0,8	8,34	0,60	3 %	1 %
92	20	364,66	32 005,26	526,81	3,34	5,02		8,39		3 %	1 %
130	15	410,95	34 806,34	520,03	2,15	5,00	1,2	8,82	1,36	2 %	1 %
131	15	395,20	34 483,20	525,74	2,21	5,06		8,70		2 %	1 %
159	12	660,48	48 930,22	445,76	1,09	5,00	0,2	6,52	2,0	2 %	1 %
174	25	592,77	44 451,44	446,08	2,61	5,01		6,65		3 %	1 %
177	12	129,57	22 340,12	742,49	2,04	12,85	0,23	23,43	1,7	3 %	3 %
191	20	136,99	23 450,64	741,43	2,95	12,80		23,04		3 %	2 %
205	30	275,70	28 020,54	661,41	3,77	8,51	0,0	14,76	1,2	3 %	2 %
213	30	226,61	22 965,58	664,76	4,23	8,51		14,92		4 %	2 %
226	30	283,00	33 471,94	668,96	3,45	9,61	0,28	14,52	2,2	3 %	2 %
233	35	261,28	31 084,68	669,57	4,65	9,88		14,85		4 %	2 %
244	15	151,80	24 572,52	1156,83	5,98	7,50	8,0 (3,0)	17,52	4,1	3 %	2 %
254	20	141,70	20 602,27	1133,00	9,26	6,90 (7,26)		16,80		4 %	2 %
263	20	137,18	20 346,68	1151,25	10,51	6,87	2,9	17,19	0,3	5 %	2 %
275	20	138,84	20 438,24	1131,13	9,98	6,67		17,25		5 %	2 %
280	20	119,88	16 723,34	1136,90	10,45	6,36	3,3	17,01	0,6	5 %	2 %
289	20	127,65	17 952,23	1147,39	10,37	6,57		17,12		5 %	2 %
330	8	180,50	120 729,29	2578,44	9,96	11,70	30,9 (2,0)	13,28	1,4	2 %	2 %
336	15	166,33	72 964,88	2480,84	32,08	8,08 (11,25)		13,46		4 %	2 %



méterek hibájaként jelentkeznek. A paraméterek hibájából a belőlük előállított reaktivitások hibájára a következő becslés adható

$$\frac{\Delta \$_{SJ}}{\$_{SJ}} = 2 \frac{\Delta b}{b}, \quad (6.41)$$

illetőleg

$$\frac{\Delta \$_{G0}}{\$_{G0}} = \frac{\Delta b}{b} + \frac{\Delta a}{a} + \frac{\Delta \alpha}{\alpha} \quad (6.42)$$

adódik, (6.41)-ben figyelembe véve, hogy a totál terület hibája a késő terület hibája mellett elhanyagolható. A számolás során mindenütt felfelé kerekítve a 6.1 táblázatban található százalékos hibákat kaptuk  $\$_{G0}$  és  $\$_{SJ}$ -ra. Innen az látszik, hogy az ily módon megmagyarázható hiba összhangban van a reprodukálás mértékével.

Egy dologról kell még említést tenni. A mért görbék, amelyek a 6.8—6.13 ábrákon láthatók, minden hasonlatosságuk ellenére (amiről később lesz szó), bonyolultabb szerkezetet mutatnak, mint a numerikusan számított 5.8—5.11 ábrák. A mért görbék bizonyos aszimmetriái, meredeken emelkedő majd lefelé forduló részei stb. a tapasztalat szerint megismételt mérésnél újra jelentkeznek, tehát nem egyedi mérési hibák következményei. Ennek ellenére úgy tűnik, hogy ezt a fajta bonyolultabb viselkedést olyan esetleges tényezők hozzák létre, mint pl. a szabályozó lemezeket tartó alumínium tok jelenléte a zóna két fala mentén, vagy a zónaelemek nem egyenletesen szoros illeszkedése, vagy egyéb olyan berendezésbeli tényezők, amelyek figyelmen kívül hagyandók a kísérleti és elméleti görbék összevetésében.

A hibák részletes tárgyalásával képet adtunk ezek természetéről és nagyságáról. Úgy tűnik, hogy a (6.41) és (6.42)-vel számított hibák feltüntetése az ábrákon az előző bekezdés fejtegetései miatt megtévesztő volna, ugyanakkor nagyobb hibát sem volna logikus megadni, mert az a reprodukálás vizsgálatának mondana ellent. Mindezt az ábrákon nem tüntettük fel a mérés hibáit.

### 6.3 Mérési eredmények

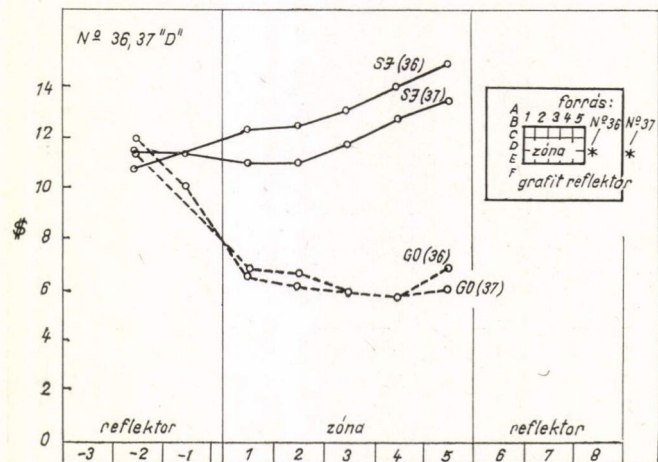
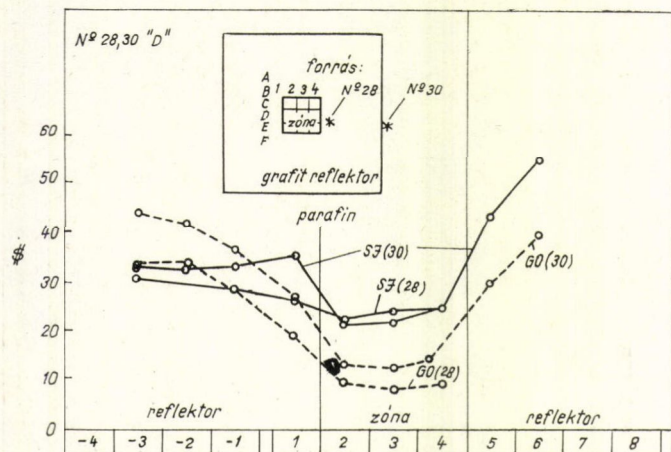
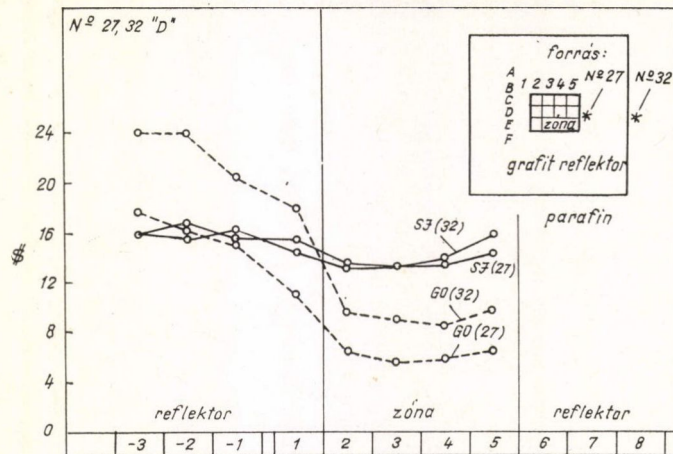
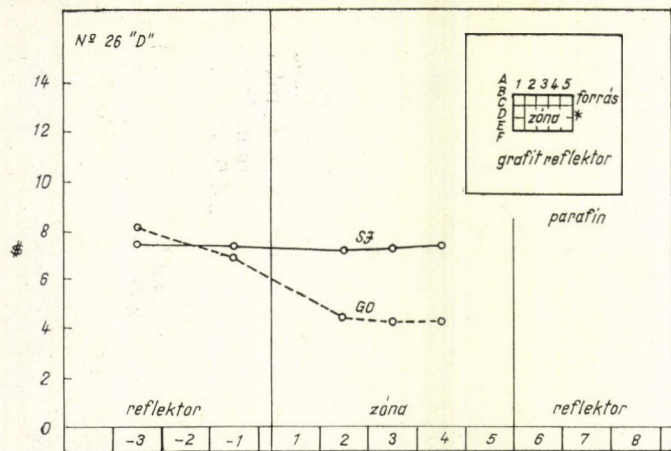
Különböző zónaelrendezésekben végeztünk méréseket. A 6.2 táblázatban foglaltuk össze az itt bemutatandó konfigurációkat.

Ezeknél több esetet vizsgáltunk meg, mert olyan mennyiségeket, mint reflektor vastagság, vagy forráshelyzet finomabb lépésekben változtattunk. Az itt nem közölt

#### 6.2 TÁBLÁZAT

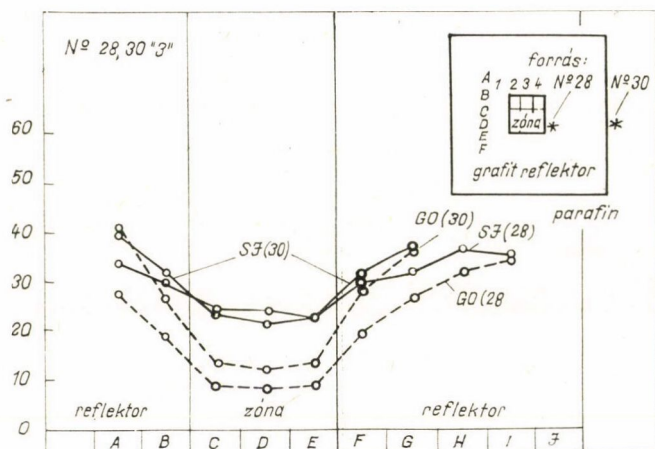
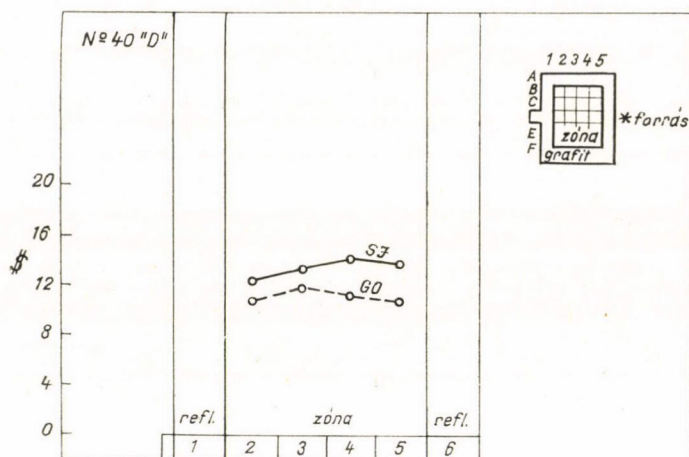
ZR-4 mérési konfigurációk egymáshoz való viszonya

		REFLEKTOR				
		20 cm GRAFIT+PARAFFIN			15 cm gr	5 cm gr
		3×5	3×4	3×3	3×5	4×5
FORRÁS:	— \$	7	14	23	14	14
	KÖZEL №	26	27	28	37	40
	TÁVOL №		32	30	36	



6.8—6.13 ábrák. A ZR—4 reaktor különböző zónakonfigurációiban mért  $\rho_{S3}$  és  $\rho_{G0}$  reaktivitások





6.8—6.13 ábrák

közbülső esetek ugyanazokat a tendenciákat mutatják, mint a bemutatott mérések. A 6.2 táblázatban az első 3 oszlopban csökkenő zónamérettel növekvő szubkritikuságú konfigurációkat találunk. Az utolsó két oszlopban a reflektor vastagság fokozatos csökkenését látjuk, miközben a szubkritikuság lényegében változatlan. Azokban az oszlopokban, ahol két zónaszámot is találunk ezek két különböző forrás helyzetnek felelnek meg, de ezek egyébként azonos konfigurációk.

A 6.2 táblázatból jól látható, hogy az első 5 konfigurációban (26, 27, 28, 30, 32) a teljes grafit + paraffin reflektor jelen volt. A zónák 3×5, 3×4 és 3×3 elem méretűek voltak, a hozzájuk tartozó reaktivitás pedig hozzávetőlegesen 7, 14, illetőleg 25 \$-nak adódott.

A paraffin reflektor eltávolítása kb. 3 \$ negatív reaktivitás változást okozott, de a megvizsgált reaktivitásmérések viselkedésében lényeges változást nem eredm-

nyezett, ezért ezt a zónát tovább nem is tárgyaljuk. Amikor a grafit reflektor vastagságát mintegy 15 cm-re (3 elem) csökkentettük, a  $3 \times 5$  elem méretű zóna reaktivitása 7  $\$$ -ról 14  $\$$ -ra változott (36/37 sz. konfigurációk). A  $4 \times 5$  elem méretű zóna mindössze 5 cm vastag (1 elem) grafitral reflektálva (40 sz. konfiguráció) kb. 13  $\$$  szubkritikus volt.

Valamennyi esetben végigmértük a vándorló detektorral a „3” és a „D” tengelyt (l. 6.2 ábra). Meghatároztuk a  $\$_{SJ}$  és  $\$_{G0}$  reaktivitásokat a megadott formulák alapján. Az így kapott eredményeket a 6.8—6.13 ábrákon láthatjuk.

## 7. Az eredmények diszkussziója, következtetések

Az elméleti eredmények jelentőségét jórészt áttekintettük a 4. fejezetben. Megvizsgáltuk az eredetileg Sjöstrandtól származó pulzált reaktivitásmérési módszert, és megtaláltuk azt az általánosítást, amely tükrözi a módszer lényegének fizikai alapjait, és kidolgoztuk azt az elméletet, amelynek útmutatásával el lehet dönteni, hogy a módszer eredeti formájában milyen feltételek mellett alkalmazható.

Megvizsgáltuk a Gozani-féle módszert és megállapítottuk, hogy ez nem tekinthető a Sjöstrand módszer javított változatának, hanem attól független, önálló mérési eljárás. Rámutattunk arra, hogy egy speciális közelítésen alapul, amely lényegénél fogva nem általánosítható, ezért a módszer alkalmazhatóságának feltételei megegyeznek a szóban forgó közelítés alkalmazási feltételeivel. Rámutattunk arra is, hogy a Gozani módszer által szolgáltatott reaktivásbecslés egy faktorban tér el a valódi statikus reaktivitástól, amely faktor jelenlétét és jelentőségét a korábbi szerzők azért nem ismerték fel, mert egy következetesen megismétlődő matematikai hibát vettek levezetéseikben.

A Sjöstrand módszer érvényességi feltételeinek tanulmányozása során megcáfoltuk azt a már tankönyvbe is bekerült állítást [5], hogy időnként tapasztalt és meglepő sikere a véletlen következménye, és megadtuk a módszer alkalmazásának valódi feltételeit: megmutattuk, hogy a módszer annál inkább használható,

- a) minél jobban hasonlít az „effektív kezdeti neutroneloszlás” a (4.29) legelőnyösebb kezdeti eloszláshoz;
- b) a rendszer minél erősebben reflektált.

Az 5. fejezetben tárgyalt numerikus vizsgálatokkal ezeket az állításokat részletesen igazoltuk, és támpontot adtunk arra nézve, hogy ezek a kvalitatív állítások a rendszert jellemző paraméterek milyen számszerű tartományában teljesülnek. Különösen jelentősnek tartjuk azt az állítást, amelyet a Sjöstrand módszer térbeli „behatárolási” tulajdonságának neveztünk (l. (4.24) képlet). Látni fogjuk a kísérleti eredmények értékelésekor, hogy ezt a tulajdonságot a gyakorlatban milyen jól lehet használni.

A kísérleti eredmények vizsgálatát azzal kell kezdeni, hogy ezek mennyiben tükrözik az elméleti és numerikus úton talált tendenciákat: elsősorban a Sjöstrand módszer viselkedését a reflektáltság és a forrás helyzet függvényében. Méréseinkben ez a két paraméter mellett még a szubkritikusságot változtattuk. Általánosságban máris kijelenthetjük a közölt ábrák alapján, hogy a kísérleti eredmények az elméleti és numerikus úton talált viselkedés minden lényeges vonását tükrözik.

Valamennyi kísérletileg vizsgált reaktor konfiguráció (talán a 40 sz. zónát kivéve, 6.12 ábra) erősen reflektált. Ennek megfelelően a Sjöstrand eredmények ke-



vésbé térfüggőek, mint a Gozani eredmények. Ez a körülmény határozottabban jelentkezik a 27/32 sz. zónában (6.9 ábra), mint a 36/37 sz.-ban (6.11 ábra), amelyek nagyjából azonos mértékben szubkritikusak, de a 27/32 sz. elrendezés erősebben reflektált. Ez pedig tökéletesen megegyezik az elméleti, illetőleg numerikus eredményekből leszűrt általános következtetéssel. A 40 sz. konfiguráció értékelése kicsit nehéz. Nem igazán szerencsés esettel állunk szemben, mert itt a zóna körben gyengén reflektált, de alul és fölül a teljes eredeti reflektor mennyiség megvan. A 40. sz. zónán mért  $S_{G0}$  és  $S_{SJ}$  görbék sem mondanak ellent a megfogalmazott állításokkal, de a görbék viselkedését pontosan megmagyarázni nem tudjuk.

A forráshelyzet nyilvánvaló módon befolyásolja a kezdeti neutroneloszlást. Azt láttuk, hogy az általunk „effektív kezdeti eloszlásnak” nevezett függvény alakja alapvetően befolyásolja a Sjöstrand módszer sikerét. Azt is láttuk azonban, hogy pusztán az, hogy a tényleges, 14 MeV-es forrásneutronok a rendszer mely részében keletkeznek, önmagában csak igen korlátozott mértékben befolyásolja az effektív kezdeti eloszlás alakját. Az, hogy a pontszerű forrásból jövő nagyenergiájú neutronok igen rövid idő alatt milyen mértékben terjednek szét a reaktorban, és közben milyen energia intervallumba kerülnek nagymértékben függ a rendszer tulajdonságaitól is. És éppen az erős reflektáltság tűnt kedvezőnek ebből a szempontból. A 6.9, 6.10 és 6.11 kísérleti ábrákon éppen ezt figyelhetjük meg. Amikor a forrást távolítottuk a zónától, a Sjöstrand reaktivitások szinte alig változtak, és továbbra is meglehetősen térfüggetlenek maradtak, legalábbis a zónában, ami azt tükrözi, hogy az effektív kezdeti eloszlás a reflektor szélén levő forrás esetében is eléggé zónában koncentrált.

Amennyire a forrás távolításával az eredmények mégis változtak, az pontosan megegyezik a numerikusan számított viselkedéssel: az 5.8—5.11 ábrákkal összevetve azt várjuk, hogy a Sjöstrand reaktivitások valamivel erősebb térfüggést mutatnak, mint központi forrás mellett, a Gozani reaktivitások pedig a zónában „feljebb” emelkednek.

Ugyancsak látható a numerikus és kísérleti görbék összevetéséből, hogy az általunk megvalósított reflektáltság tartományhoz képest az 5.8—5.11 ábrák szerint numerikusan jóval szélesebb tartományt vizsgáltunk. Látni fogjuk, hogy ugyanezt mondhatjuk a kezdeti eloszlás tartományáról is. A numerikus vizsgálatokban a forrás mindig szimmetrikus volt, a valóságos kísérletekben a forrást aszimmetrikusan helyeztük el még a zónához közeli helyzetben is. A 6.13 ábrán a 28/30 sz. elrendezés „3” tengelye mentén mért  $S_{SJ}$  és  $S_{G0}$  eredményeket láthatjuk, vagyis a forrást tartalmazó szimmetria tengelyre merőleges mérést. Ez szimmetria okokból mentes az aszimmetrikus felharmonikusoktól. A 6.13 és 6.10 ábrák összehasonlítása az effektív kezdeti eloszlás fogalom sikerét tükrözi: nincsen lényeges különbség a „D” tengely mentén mért eredmények és a „3” tengely mentén mért eredmények között, mert az effektív kezdeti eloszlás lényegében szimmetrikus — a rendszer alapvető szimmetriája következtében. (Nyilvánvaló, hogy alapvetően aszimmetrikus rendszerben az effektív kezdeti eloszlás aszimmetrikus volna. Ilyen rendszerben azonban az  $f_s(v)P\psi$  alakú kezdeti eloszlás maga is aszimmetrikus.)

Amikor a 4. fejezetben a T1—T4 átmeneti eloszlásokat tekintettük, csak azt vizsgáltuk, igaz-e, hogy a C- és R-pulzusokhoz képest reálisabbnak tűnő kezdeti eloszlások hatására az extrém C- és R-eredmények közé eső eredményeket kapunk-e. A numerikus ábrákat a kísérletekkel összevetve már azt is kimondhatjuk, hogy az effektív kezdeti eloszlás a mi kísérleteinkben feltétlen a C- és R-pulzusok között he-



lyezkedik el, mert a kísérleti görbék alakra belül vannak a numerikus  $S(C)$  és  $S(R)$  görbék által határolt tartományon.

A 6.8, 6.9, 6.10 ábrákat nézve látható, hogy a szóban forgó tendenciák hasonló módon tapasztalhatók nagyobb negatív reaktivitás esetén is, de a módszerek egyöntetűen már nem annyira megbízhatóak.

Reaktivitásmérésről lévén szó, a legfontosabb kérdés végül is az: mennyi a reaktivitás? Ezt a kérdést csak kerülő úton lehet megválaszolni. A mért reaktivitások viselkedése ugyanazokat a tendenciákat mutatja, mint a numerikus eredmények. Ha az 5.10 ábrát összevetjük a 6.8, 6.9, 6.10 és 6.13 ábrákkal, a hasonlóság rendkívül szembeötlő: a mért Sjöstrand görbék térbeli viselkedése átmenetet képvisel a 5.10 ábra  $SJ(C)$  és  $SJ(R)$  görbéi között; a Sjöstrand és Gozani görbék relatív elhelyezkedése pedig a numerikus görbékével azonos. A numerikus ábrákon természetesen a konzisztens módon kiszámított statikus reaktivitás is fel van tüntetve. Az 5.10 ábrán a statikus reaktivitás a zónán belül határozottan a Sjöstrand mérések által elfoglalható tartomány belsején halad keresztül. Figyelembe véve, hogy a kísérleti görbék viselkedése milyen részletesen és pontosan megfelelt a numerikus görbéknek, fel kell tételezzük, hogy a kísérletekben a valódi statikus reaktivitás *szintén* a Sjöstrand mérés zónabeli értékeinek tartományán belül van. Ez a tartomány a vizsgált esetekben elég szűk, ami az erős reflektáltság következménye, így ez a reaktivitás kellő pontosságú meghatározását jelenti. A valódi reaktivitás értékét ugyanide helyeznénk akkor is, ha a (4.24) kifejezés szerint a Sjöstrand eredmények zónabeli értékkészletét, mint a reaktivitás lehetséges tartományát tekintjük. Ehhez persze a zóna minden pontjában szükség van  $S_{SJ}$  mérésre. A mi méréseinkben ez nem szigorúan érvényes, mert csak két merőleges tengely mentén mértünk („D” és „3” tengely) és a detektorok függőlegesen kb. a zóna felét fedték át.

Hogy a gyakorlatban mi az, ami jobban hozzáférhető: a zóna minden pontjában mérni, vagy néhány jellegzetes pontban mérni, és a tapasztalt viselkedést numerikus eredményekkel összevetni: ez általánosságban nem mondható meg. Mindkettőt csak közelítőleg lehet elvégezni. A zóna minden pontjában mérni eleve reménytelen, sok konkrét esetben örülni kell, ha egyáltalán zónán belül elhelyezett detektort lehet használni. A numerikus vizsgálatban a legnehezebb kérdés a megfelelő kezdeti neutron eloszlás meghatározása. Kétségtelen, hogy kellően bonyolult módszerekkel (transzport vagy Monte-Carlo számításokkal) lehetne pontosabb kezdeti eloszlást is számítani, mint a mi C- és R-pulzusaink. Mégis, úgy érezzük, több haszna van ezekkel a szélsőséges forrás alakokkal végezni átfogóbb numerikus kísérletsorozatot, mint a pontos számítás elvégzésére törekedni.

Vannak olyan törekvések [33], amelyek a szubkritikus reaktivitás meghatározásában a fő szerepet a számításnak kívánják adni, véleményünk szerint a valóságos, bonyolult felépítésű zónák pontos számítása még mindig túl nehéz feladat ahhoz, hogy a reaktivitás meghatározásának rendszeresen használt útja a számítás lehetne. Jogosnak látszik feltételezni ugyanakkor, hogy éppen azok a komplikáló tényezők (a szabályozó rudak elhelyezkedésének 3 dimenziós képe, a kiégett zónák szabálytalan anyagi összetétele stb.), amelyeknek legfőbb szerepük van a mérni kívánt reaktivitás beállításában, és amelyek megghiúsítják a kellően pontos statikus számítást — nem befolyásolják lényegesen azt, hogy egy adott kinetikus mérési módszer jól használható vagy sem. Ez utóbbit sokkal inkább a reaktor általános jellemzői határozzák meg, mint dúsitás, moderáltság, zóna méret, reflektáltság. Abban látjuk a numerikus kísérletezésre alapozott reaktivitás-mérés jelentőségét, hogy a rend-



szer megfelelően választott közelítő modelljével végezve a számításokat, azt ugyan nem tudjuk pontosan megmondani, hogy mennyi a reaktivitás, de választ tudunk adni arra a kérdésre, hogy a lehetséges mérési módszerek közül melyik, milyen elrendezésben használható leginkább. Ezt a technikát akár önálló mérési módszernek is felfoghatjuk.

### KÖSZÖNETNYILVÁNÍTÁS

Köszönetemet fejezem ki mindenekelőtt *Kosály Györgynek*, akinek vezető szerepe volt a közösen végzett elméleti munkában. Az ő állandó közreműködése nélkül ez a munka nem jöhetett volna létre.

Nyomatékkal kell kiemelnem *Szabó Ferenc* igazgatóhelyettes segítségét, aki kezdettől fogva érdeklődést tanúsított a munkám iránt és állandóan támogatta a viszonylag nagy apparátust igénylő és időnként talán elvontnak tűnő kísérleteket.

Köszönettel tartozom még a következőkben említendő munkatársaknak. A munka korai fázisában sok diszkussziót folytattam *Szatmáry Zoltánnal*. Az ő segítségével oldottuk meg a centrális differencia módszer sajátos viselkedésének problémáját, ami a későneutron bomlás tanulmányozása során merült fel. Az egy-csoport diffúziós számításokban *Kondor András* is közreműködött. Az integrális módszer numerikus igazolásában és az időintegrálokat közvetlenül számító program megírásában *Fischer Ádámnak* volt jelentős tevékenysége. *Vigassy József* írta a legkisebb négyzetek módszerével működő automatikus exponenciális illesztő programot, amelyet a kísérletek kiértékelésében használtunk. *Pór Gábor* végig aktívan részt vett a kísérleti munkában.

### IRODALOM

1. Z. Gyimesi and J. Valkó, Investigation of the dynamic properties of the critical assembly ZR—4. Reaktor-konferencia Varsó, 1968.
2. Z. Szatmáry, J. Valkó, P. Vértes, Status report on reactor physics calculations. Reaktor-konferencia Varsó, 1968.
3. T. Gozani, A modified procedure for the evaluation of pulsed source experiments in subcritical reactors. Nukleonik 4, 348, 1962.
4. Sjöstrand, N. G., Measurement on a Subcritical Reactor Using a Pulsed Neutron Source. Arkiv Fysik 11, 233, 1956.
5. Bell, G. I., S. Glasstone: Nuclear Reactor Theory, Chapter 10, New-York: Van Nostrand Reinhold Company 1970.
6. Gozani, T., Consistent Subcritical Fast Reactor Kinetics, in: Dynamics of Nuclear System. p. 109. Tucson: University of Arizona Press 1972.
7. Preskitt, C. A., E. A. Nephew, I. R. Brown, K. R. van Howe, Interpretation of Pulsed Source Experiments in the Peach Bottom HTGR. Nucl. Sci. Eng. 29, 283, 1967.
8. A. F. Henry, The Application of Inhour Modes to the Description of Nonseparable Reactor Transients. Nucl. Sci. Eng. 20, 338, 1964.
9. B. E. Simmons and J. S. King, A Pulsed Technique for Reactivity Determination. Nucl. Sci. Eng. 3 595, 1958.
10. G. R. Keepin: Physics of Nuclear Kinetics. Addison-Wesley Publishing Company, Inc. 1965. 252. oldal
11. G. R. Keepin, Physics of Nuclear Kinetics. Addison-Wesley Publishing Company, Inc. 1965. 256. oldal.
12. A. I. Mogilner, Z. Szatmáry, G. Kosály, A New Method for the Measurement of Reactivity in Absolute Units and for the Experimental Determination of the Excess Reactivity. Atomkernenergie 19, 1—10, 1972.
13. Garelis, E., I. L. Russel, Theory of Pulsed Neutron Source Measurements. Nucl. Sci. Eng. 16, 263, 1963.



14. *Becker, M., K. S. Quisenberry*, The Spatial Dependence of Pulsed Neutron Reactivity Measurements. Univ. of Arizona Symp. Neutron Dynamics and Control 1965.
15. *Gyimesi Z., Haugset K., and Oei T. D.*, Reactivity Worth of Water Height in Nora H<sub>2</sub>O Core No. I. Nora Lab. Memo No. 134, Institutt for Atomenergi, Norway. 1966.
16. *Masters, C. F., K. B. Cady*, A Procedure for Evaluating Modified Pulsed-Neutron-Source Experiment in Subcritical Nuclear Reactors, Nucl. Sci. Eng. 29, 272, 1967.
17. *Debrue J., Delrue R., Rotter W. and Van Deyck D.*, Subcritical experiments BN—6908—03. C. E. N. Belgium. 1969.
18. *N. Corngold*, On the Analysis of Pulsed Multiplying Systems. GA—5404, General Atomic. 1964.
19. *T. Gozani et al.*, On the Modified Pulsed Source Techniques. Karlsruhe Symp. Pulsed Neutron Research, International Atomic Energy Agency 1965.
20. *O. Aizawa*, Reactivity Analysis by Spectral Corrected Garelis-Russel Method. Journal of Nucl. Sci. Tech. 6, 498—507, 1969.
21. *R. Hecker*, Személyes közlés.
22. *Kosády, G., J. Valkó*, Investigation of the Area-Ratio Method of Pulsed Reactivity Determination. J. Nucl. Energy 25, 297, 1971.
23. *C. E. Cohn*, Nucl. Sci. and Eng. 13, 1962.
24. *A. A. Wasserman*, Doctoral Thesis. Mass. Institute of Technology. IDO—16755 1962.
25. *Waltar, A. E., L. Ruby*, Interpretation of Pulsed-Source experiments in a Reflected Reactor. Nukleonik 8, 287, 1966.
26. *Waltar, A. E., L. Ruby*, Pulsed-Source Reactivity Measurements in a Reflected Reactor, Nukleonik 10, 70, 1967.
27. *Mogilner, A. I., E. Semenov, F. Shvetsov, Z. Szatmáry*, Theoretical and Experimental Investigation of Reflected Reactors (in Russian). KFKI—23, Central Research Institute for Physics, Budapest 1969.
28. *Vandeplass, P.*, Analysis of the Measurement of the Reactivity Corresponding to the Static Fundamental Mode of Far Subcritical Systems. RCN—98, Statistical Methods in Experimental Reactor Kinetics and Related Techniques, Proc. Symp. Petten, 1967. p. 555.
29. *Dragt, J. B.*, On the applicability of Sjöstrand's Area Method for Reactivity Measurement of Pulsed-Neutron Technique. Nucl. Sci. Eng. 50, 216, 1973.
30. *G. Kosády and J. Valkó*, Remarks on the Use of Wellknown Reactivity Measuring techniques by the Pulsed Neutron Method, Annals of Nuclear Energy, 2, 477—482, 1975.
31. *Kosády, G., A. Fischer*, On Integral-Versions of the Area-Ratio Method of Pulsed Neutron Reactivity Measurements. J. Nucl. Energy 26, 17, 1972.
32. *A. Kondor and G. Kosády*, Analysis of Pulsed-Source Reactivity Determination in a Reflected Reactor. J. Nucl. Energy 25, 589—598, 1971.
33. *P. B. Parks, C. E. Ahlfeld, J. D. Spencer, J. W. Stewart*, Application of Space-Time Diffusion Theory to Subcritical Pulsed Neutron Experiments. DP—MS—72—46, 1974. Savannah River Laboratory E. I. du Pont de Numours et Co.
34. *Garelis, E.*, Theory of Pulsing Techniques. Nucl. Sci. Eng. 18, 242, 1964.
35. *G. Kosády, J. Valkó, Á. Fischer*, Theory of the Area-Ratio Method of Subcriticality Determination. Atomkernenergie, 23, 251—259, 1974.
36. *M. E. Radd*, WIGLE—40, A Two-Group, Time Dependent Diffusion Theory Program for the IBM—7040 Computer, IDO—17125, 1965. Phillips Petroleum Company, Atomic Energy Division.
37. *G. Kosády and J. Valkó*, Application of a Space-Time Dependent Diffusion Theory Program for Reactor Kinetic Problems. KFKI—5013. 1970.
38. *R. D. Richtmyer*, Difference Methods for Initial-value Problems. New York and London-Interscience, 1957.
39. *Stumbur E.*, On Measuring Reactivity by the Pulsed-Source Methods. Atomn. Energ. 29, 212, 1970.
40. *Fischer Á.*, Személyes közlés.
41. *H. Greenspan, C. N. Kelber, D. Okrent*: Computing Methods in Reactor Physics. Gordon and Breach Science Publishers, 1968.
42. *Z. Szatmáry, J. Vigassy*, SISYPHUS. A Code for the Solution of Few-group Diffusion Equations in Two Dimensions. KFKI—70—13. RPT.
43. *Mehdat, M., El-Zeftawy, and L. Ruby*, Kinetic Distortion in a TRIGA Reactor with an Asymmetric Reflector. Nucl. Sci. Eng. 45, 251, 1971.
44. *Difilippo, F. C., N. B. Pieroni, I. C. Vinez*, Measurements of Spatially Independent Reactivity in Pulsed-Neutron Experiments. Nucl. Sci. Eng. 51, 262, 1973.
45. *F. Szabó et al.*, The Zero Power Reactor ZR—4. KFKI. 1968, Budapest.



46. Z. Szabó: Pulsed Neutron Source for Reactor Physics. Nuclear Instruments and Methods. 78, 199—205, 1970.
47. Vigassy J., Személyes közlés.
48. Szatmáry Z., Program RFIT. Személyes közlés.
49. L. Lapidus, J. H. Seinfeld: Numerical Solution of Ordinary Differential Equations. Academic Press, New York and London. 1971.

# EGYENLETES TÖMEGELOSZLÁSÚ TÉR METRIKÁJÁNAK ELŐÁLLÍTÁSA TÉREGYENLETEK NÉLKÜL\*

CSOMA ZSIGMOND

1. A klasszikus fizika szerint az  $R$  sugarú állandó  $\rho$  sűrűségű homogén közegben a középponttól  $r$  távolságban tartózkodó  $m$  tömegű részecskére ható gravitációs erő sugárirányú komponense:

$$m \frac{d^2 r}{dt^2} = -\gamma \frac{m 4 r^3 \pi \rho}{3 r^2}, \quad \frac{d^2 r}{dt^2} = -k^2 r, \quad k^2 = \frac{4}{3} \pi \gamma \rho \quad (1)$$

differentiálegyenlet megoldása:  $r = r_{\max} \cdot \sin(k t + \alpha_0)$ . A sugárirányú sebesség:  $v = \frac{dr}{dt}$  maximuma  $r_{\max} \cdot k$ . Ha  $R$  és  $\rho$  elég nagy, túlnőhet a fénysebességnél, tehát a relativitás elméletének ellentmond.

2. A speciális relativitás-elmélet alapján — megint csak radiális mozgást vizsgálva — a mozgásegyenlet:

$$\frac{d}{dt} \left( \frac{m_0 v}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} \right) = -\gamma \frac{m_0 4 \pi \rho r}{3 \sqrt{1 - r^2/c^2}}; \quad \frac{dr}{dt} = - \left( 1 - \frac{v^2}{c^2} \right) \frac{4}{3} \pi \gamma \rho r$$

megoldása  $v$ -re:

$$-\frac{c^2 \cdot v \cdot dv}{c^2 - v^2} = \frac{4}{3} \pi \gamma \rho \cdot \underbrace{v \cdot dt}_{dr},$$

ahonnan

$$v^2 = c^2 - (c^2 - v_0^2) \cdot \exp \frac{k^2}{c^2} r^2 \geq 0; \quad v_0^2 \geq c^2 \left( 1 - e^{-\frac{k^2 R^2}{c^2}} \right),$$

tehát elég nagy  $R$  esetében a középponti (kezdő) sebesség tetszőlegesen megközelelti a fénysebességet.  $R \rightarrow \infty; v \rightarrow c$ .

3. Ahogyan az 1975-ös közleményben [1] a magában álló gömbszimmetrikus tömegén kívüli gravitációs tér metrikáját leírtuk, épp úgy a gömb belsejében a négydimenziós téridő ívelemnyezetét szintén:

$$ds^2 = f^2 c^2 dt^2 - h^2 dr^2 - r^2 (d\vartheta^2 + \sin^2 \vartheta d\varphi^2)$$

\* Érkezett 1976. okt. 15.



alakúnak tételezzük fel;  $f^2$  és  $h^2$  csak  $r$  függvényei. Mivel a vizsgált háromdimenziós nem-euklidesi tér minden pontjában azonosak a geometriai tulajdonságok, állandó „ $a$ ” görbületi sugara van, mint hiperszférának, azaz

$$h^2 = \frac{1}{1-r^2/a^2}, \quad r \leq R \leq a. \quad (2)$$

A folytonosság céljából a gömb belseje és külseje között az átmenetet az  $R^2/a^2 = \frac{2\gamma M}{c^2 R}$  biztosítja, tehát  $a^2 = \frac{c^2 R^3}{2\gamma M}$ . (3)

Állandó  $\rho$  sűrűségű tömegeloszlásról lévén szó,  $M = \rho V$ , ahol

$$V = \int_0^R \frac{4\pi r^2 dr}{\sqrt{1-r^2/a^2}} = 2\pi a^3 \left( \arcsin \frac{R}{a} - \frac{R}{a} \sqrt{1-R^2/a^2} \right).$$

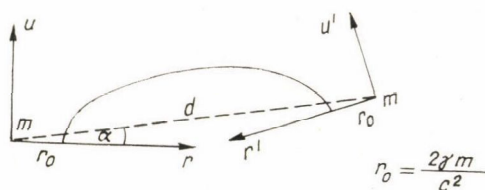
Ha  $R$  jóval kisebb mint  $a$ , akkor  $V = \frac{4}{3} R^3 \pi$  és ekkor  $a^2 = \frac{3c^2}{8\pi\gamma\rho}$ . A fent említett [1] közleményben megállapított  $f^2 h^2 = 1$  összefüggés most nem érvényes, mert az ottani (11) egyenlet szerint a geodetikus vonalon

$$\frac{d^2 r}{d\tau^2} = \frac{1}{2} \left[ -c^2 \frac{d}{dr} \left( 1 - \frac{r^2}{a^2} \right) \right] = \frac{c^2 r}{a^2}; \quad d\varphi = d\vartheta = 0,$$

tehát a klasszikus elmélettel szöges ellentétben taszítás adódik a középpont felé mutató vonzás helyett. Az  $f^2(r)$  függvény meghatározásához további, a fizikai körülmények (külső, illetőleg belső nyomás, halmazállapot) ismeretén alapuló feltevésekre volna szükség. [2, 3]

4. Vizsgáljuk meg az  $R=a$  határesetet. Ekkor az egész homogén tér összterfoglata  $V = \pi^2 a^3$ , ahol  $a = \frac{c}{\sqrt{2\pi^2\gamma\rho}}$ . (4)

Az utóbbi eredményt a következő becsléssel megközelíthetjük. Képzeljünk el egy sorban egymástól  $d \gg r_0$  távolságban álló egyenlő  $m$  tömegű gömb alakú testeket. Ezek környezetében a geometria legyen az [1]-ben tárgyalt, azaz  $h^2 = (1 - r_0/r)^{-1}$ ,



továbbá az egyik  $m$ -hez tartozó geodetikus vonal folytonosan és törés nélkül menjen át a szomszédos  $m$ -hez tartozó megfelelő geodetikus vonalba. Az  $u$  és  $u'$  tengelyek ([1]-ben  $z$ ) metszéspontja lesz a hiperszféra  $O$  középpontja:  $Om = a$ . Ha  $r \approx d/2$ , akkor

$$\operatorname{tg} \alpha = \frac{du}{dr} = \sqrt{\frac{r_0}{r-r_0}} = \frac{r}{a}; \quad a^2 \approx \frac{r^3}{r_0} = \frac{r^3 c^2}{2\gamma m} = \frac{d^3 c^2}{16\gamma m}.$$

A tér átlagsűrűsége:  $\frac{m}{d^3} = \rho$  és így  $a^2 \approx \frac{c^2}{16\gamma\rho}$ , ami közel áll a fenti eredményhez.

A homogén határtalan térben a fény terjedési sebessége nem függhet a helytől, mivel pedig a  $\rho$  tömegsűrűség igen kicsi, ezért  $f^2=1$ . Ekkor pedig az [1] (10) egyenlete szerint  $\left(\frac{dr}{d\tau}\right)^2 = \frac{\alpha^2 - c^2}{h^2}$

$$\frac{d^2 r}{d\tau^2} = -\frac{\alpha^2 - c^2}{a^2} r = -\left(\frac{dr}{d\tau}\right)^2 h^2 \frac{r^2}{a^2}; \quad \left(\frac{h dr}{d\tau}\right)^2 = \left(\frac{d\sigma}{d\tau}\right)^2 = \alpha^2 - c^2; \quad \frac{d^2 \sigma}{d\tau^2} = 0!$$

Mivel az „univerzum” tömegében minden részecske jelen van, és az előzők szerint ezek mozognak, a tömegeloszlás és így  $\rho$  változik, tehát  $R=a$  sem marad időben állandó.

5. Tegyük fel tehát, hogy  $R=a$  az idő függvénye. A  $d\sigma^2$  geometriai ívelem-négyzet a  $\chi = \arcsin \frac{r}{R}$  bevezetésével:

$$d\sigma^2 = [R(t)]^2 \{d\chi^2 - \sin^2 \chi (d\vartheta^2 + \sin^2 \vartheta d\varphi^2)\} \quad (5)$$

alakban írható. Ha  $d\varphi = d\vartheta = 0$ , akkor  $d\sigma = R \cdot d\chi$ . Válasszuk galaktikánkat origónak. Ekkor egy másik tőlünk mért távolsága, ha  $\chi \ll 1$ ,  $\sigma = R\chi$ . A kölcsönös sebesség:  $\dot{\sigma} = \dot{R}\chi$ , tehát — ha  $l = \sigma \ll R$ , akkor

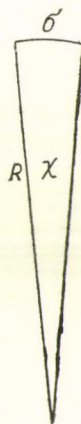
$$v = \dot{\sigma} = \frac{\dot{R}}{R} \sigma = \frac{\dot{R}}{R} l.$$

Adott pillanatban egy galaktika távolodási sebessége arányos a távolsággal (Hubble). [4]

A relatív gyorsulás:  $\dot{v} = \ddot{\sigma} = \ddot{R}\chi = \frac{\ddot{R}}{R}\sigma$ . Ezt összevethetjük az első részben nyert eredménnyel:  $\frac{\ddot{R}}{R} = \frac{\dot{\sigma}}{\sigma} = -k^2 = -\pi^2 \gamma \rho$ , következésképp

$$\left. \begin{aligned} R &= R_{\max} \sin(kt + \alpha_0) \\ \dot{R} &= k R_{\max} \cos(kt + \alpha_0) \end{aligned} \right\} \frac{\dot{R}}{R} = \frac{k}{\operatorname{tg} \varphi} = H(t)$$

a Hubble-féle konstans jelenlegi értéke,  $\operatorname{tg} \varphi$  az univerzum pillanatnyi állapotát fejezi ki. Csillagászati megfigyelések szerint  $\operatorname{tg} \varphi < 1$ .



# IRODALOM

1. Csoma Zs., Magyar Fiz. Folyóirat 23, 185, 1975.
2. H. Arzelies: Rel. gen. II. Gravitation. G. V. Paris, 1961.
3. F. Kottler, Ann. der Physik. 56, 437, 1918.
4. H. A. Atwater: Introduction to Gen. Rel. Oxford, 1974.



*Megjegyzések a korrektúránál:*

A klasszikus fizikában is tárgyalható az egyenletes tömegeloszlású, táguló gömb. Sugarára nemcsak oszcilláló, hanem az idővel monoton növekvő megoldás is adódik.

A speciális relativitás elmélete szerint a mozgásegyenlet a Minkowski-féle erőre vonatkozik, de ennek matematikai következménye a felírt „radiális mozgásegyenlet”.

A (2) egyenlet az előtte levő állítással együtt csupán lehetőség, ami a határtalan homogén tér esetén szükséges feltétellé válik a 4. rész értelmében,

A klasszikus analógia helyett az 5. részben a geodetikus vonalat is meghatározhatjuk, és ebből következik az időben lineárisan változó görbületi sugar lehetősége.

# KÖNYVISMERTETÉS

**L. B. Felsen: Transient Electromagnetic Fields  
Springer-Verlag, Berlin 1976.**

A könyv a Springer kiadó „Topics in Applied Physics” sorozat tizedik köteteként jelent meg. 5 fejezetből áll, terjedelme 270 oldal.

Áttekintést ad a különböző transziens elektromágneses hullámjelenségek elméletéről és azok számítási módszereiről. Célkitűzése kettős: egyrészt a terület oktatásához kíván segítséget nyújtani, másrészt az érdeklődésre számot tartó legújabb kutatási, gyakorlati eredményeket ismerteti.

Az első fejezet összefoglalja a transziens elektromágneses terek alapvető ismereteit, összefüggéseit, és ezek alapján hullámterjedési és diffrakciós problémákat tárgyal nem-diszperzív és diszperzív közegben. Így foglalkozik az elektromágneses tér egyenleteivel és határfeltételeivel, a sajátfüggvények szerinti sorfejtéssel, harmonikus időfüggvényű terek esetén az inverz Fourier, vagy Laplace transzformáció kérdésével, impulzus hullám diffrakciójával és terjedésével nem-diszperzív és diszperzív közegben.

A második fejezet az integrálegyenleteket, a kapcsolatos mumerikus módszereket és ezeknek transziens szóródási problémák megoldására történő alkalmazását ismerteti.

A harmadik fejezet az utóbbi időkben kidolgozott, szingularitások szerinti sorfejtés módszerét tárgyalja, számos, antennákra és reflektorokra történő alkalmazási példával illusztrálva. A módszer az elektromágneses válaszjel kétoldalas Laplace-transzformáltjának azon tulajdonságán alapul, hogy a szingularitások jellemzik az elektromágneses választ, mind az idő, mind a komplex frekvencia tartományban. Alkalmazásként, többek között, véges méretű vezető testek felületi töltés- és árameloszlását tárgyalja, valamint az ilyen testek sugárzási és szóródási problémáit. Foglalkozik a szükséges numerikus módszerekkel is.

A negyedik fejezet lineáris antennák sugárzásának és vételének transziens jelenségeivel foglalkozik. Tárgyalja a probléma klasszikus megoldását a Fourier (vagy Laplace) transzformáció analitikus és numerikus alkalmazásával, analitikus megoldást mutat be a problémának Gauss-impulzus gerjesztésű, reflexiómentes lineáris antennára történő visszavezetésével. Foglalkozik az árameloszlás tér-idő integrodifferenciálegyenletével és a numerikus megoldási módszerekkel, valamint az időtartománybeli Hallen-típusú integrálegyenlettel.

Az ötödik fejezet a földben terjedő impulzus hullámok szóródási jelenségeivel foglalkozik. Ismerteti a dipólus sugárzását homogén földben és féltérben.

A könyv célkitűzésének megfelelően olyan szakemberek ajánlható, akik áttekintést kívánnak nyerni a transziens elektromágneses hullámjelenségekről, ill. az ismertetett rész problémák legújabb kutatási és alkalmazási eredményeit kívánják munkájukban hasznosítani.

*Bárdi István*

**R. Glowinski, J. L. Lions: Computing Methods in Applied Sciences**

**Lecture Notes in Physics, 58. kötet  
Springer-Verlag, 1976**

A kötet a „Second International Symposium on Computing Methods in Applied Sciences and Engineering” című konferencián elhangzott előadások egy részét tartalmazza. (Az előadások másik része a Lecture Notes in Economics and Mathematical Systems 134. kötetében jelenik meg.) A konferencián, amelyet az IRIA-LABORIA szervezett, több mint 400 kutató vett részt; a kötetben 25 előadás anyaga található (10 francia, 15 pedig angol nyelven.) Az előadások témák szerinti megosz-



lása: Általános módszerek (3 dolgozat); Nem-lineáris módszerek, véges elemek módszere (5 dolgozat); Meteorológia (5 dolgozat); Oceanográfia (5 dolgozat); Folyadékmechanika (7 dolgozat).

A nagy érdeklődésre való tekintettel a sorozat következő konferenciáját 1977 decemberében tartják. A kiadvány hasonlóan nagy érdeklődésre tarthat számot meteorológusok, hidrodinamikával foglalkozó fizikusok, mérnökök körében.

*Szabó János*

**Landolt-Börnstein: Gleichgewicht der Absorption von Gasen in Flüssigkeiten;**

**Absorption in Flüssigkeiten von niedrigem Dampfdruck**

**6. Auflage, Neue Serie, Teil IV, Band 4c-1 Springer-Verlag**

A kötet tartalmát eredetileg a IV/4b kötetben szándékozták kiadni, azonban az ide vonatkozó anyag terjedelme ezt nemhogy nem tette lehetővé, hanem még további két kötetet igényelt. E kötet az alacsony gőznyomású folyadékokban történő gázabszorpcióval foglalkozik. Az irodalmi adatokat 1975-ig dolgozza fel.

Az elméleti bevezetés 28 oldal terjedelmű. E rész összefoglalja az abszorpcióval kapcsolatos termodinamikai törvényszerűségeket, definiálja az oldhatósági tényezőket, közli az oldhatósággal kapcsolatos elméleteket. Külön tárgyalja a binér, ternér és multinér rendszereket.

A lényegi részt tulajdonképpen a technikai oldhatósági tényező vs. T diagramok alkotják. Egy diagramon általában több gáz görbéi találhatók, vagy pedig egy gáz görbéit változó nyomásértékeknél ábrázolták. A nemzetközi egységekben mért oldhatósági tényező rendszerint mellék-tengelyként kapott helyet a diagramokon. Az anyagok rendszerezése elsősorban az oldószer, másodsorban az oldott gáz szerint történt, azonban eltér a szokásos LB-rendszerezéstől. Az egyes rendszerek diagramjai a regiszterek alapján könnyen megtalálhatók. A kötet kb. 1100 rendszert tárgyal és 186 folyadék illetve elegy adatait tartalmazza. Víz esetében pl. 93 gáz abszorpciójával foglalkozik. Egy oldószer esetében átlagosan kb. 10 gáz abszorpció diagramjait adja meg.

A kötet szép kiállítású, a diagramok minősége kiváló. A könyv a tudomány és technika számos területén nyújthat nívós segítséget a felhasználónak.

*Raksányi Kund*

**A. W. Thomas (editor): Modern Three-Hadron Physics**

**Topics in Current Physics, Volume 2,**

**Springer-Verlag, Berlin 1977**

A kötet végigvezeti az olvasót a három-részecske szórás elméletének alapjaitól az alkalmazásokig. Céltűzése szerint részletes bizonyításokat és levezetéseket is közöl. Természetes, hogy a háromtest-probléma ilyen mélységben való teljes áttekintése nem lehetséges — inkább szemelvényeket kapunk, amelyek azonban érintik a legfontosabb kérdéseket. A válogatás egyik erénye, hogy fizikus szemszögből készült, az egyes cikkek a fizika oldaláról közelítik meg a problémákat. I. R. Afnan és A. W. Thomas rövid összefoglalót ad a Fagyejev-egyenlet matematikai tulajdonságairól: megmutatják, hogy hogyan tartalmazza az integrálegenlet együtt a dinamikát és a határfeltételeket. A Fagyejev-egyenlet operátoralgebrára alapozott szigorú levezetését adják arra az esetre, amikor a kezdeti — és a végállapotban három szabad részecske van. A fizikai megértést a talán legegyszerűbb példával, a három azonos, csak S-állapotban, szeparábilis potenciállal kölcsönható, zérus spinű részecske példájával segítik elő. (Ez a példa egyébként az egész kötetben végigvonul.) R. L. Dodd a háromtest-amplitúdók analitikus tulajdonságait vizsgálja a tömeghéjon. Matematikai segédeszközök az integrálegenletek Fredholm-elméletét használja.

Különösen tanulságos a háromtest végállapot-kölcsönhatások elméletéről szóló fejezet, hiszen ezeknek a kölcsönhatásoknak olyan folyamatokban van fontos szerepük, mint például a  $K \rightarrow 3\pi$  bomlás vagy az  $nd \rightarrow nnp$ ,  $\pi N \rightarrow \pi\pi N$  reakciók. R. D. Amado meghatározza a Fagyejev-amplitúdókra vonatkozó csatolt egyenletrendszer azon minimális részét, amely biztosítja az unitaritást. A határfeltétel-formalizmus teljes és körültekintő kifejtését kapjuk a háromtest-rendszere D. D. Brayshaw cikkében. A Fagyejev-elméletnek ez az átfogalmazása különösen fontosá válik azokban az esetekben, ahol már nem bízunk a potenciál-képben (például „realisztikus” potenciálok egész osztálya ugyanazokat az értékeket szolgáltatja a megfigyelhető mennyiségekre).

A relativisztikus háromtest-probléma tárgyalása (R. Aaron) mellett magfizikai alkalmazások sora egészíti ki a kötetet. A direkt reakciók elmélete éppen azt a közelítést jelenti, amelyben a magot



kevés szabadsági fokkal írjuk le. Ezek sok fontos esetben (pl. ha a lövedék nem hatol be mélyen a mag belsejébe vagy gyorsan mozog a mag nukleonjaihoz viszonyítva) a háromtest-probléma szabadsági fokaival azonosíthatók. E. F. Redish egyrészt ilyen alkalmazásokat tekint át, másrészt a valódi háromtest-kölcsönhatások magfizikai szerepét vizsgálja.

A kötet anyagának jelentős hányada eddig csak dolgozatokban és jegyzetekben volt hozzáférhető, és most jelenik meg először könyv alakban. Az ebből adódó magas színvonal elengedhetetlenül teszi, hogy az olvasó ismerje a szóráselmélet alapjait.

*Fái György*

**E. D. Hinkley (ed.): Laser Monitoring of the Atmosphere**

**Topic in Applied Physics  
Springer-Verlag, 1976**

Az 1960-as évek elején általános téma volt az irodalomban, hogy az újonnan felfedezett lasereket vajon mire lesz lehetséges felhasználni. Sok javaslat hangzott el, és az évek folyamán sok is valósult meg belőlük, pedig kételkedés kísérte őket. Ma már látjuk, hogy egyes alkalmazási területek szinte vártak a laser megjelenésére, hiszen a felhasználni próbált klasszikus fényforrások nem voltak alkalmasak a kitűzött feladat megoldására. Egy ilyen feladat az atmoszféra laserrel való vizsgálata radar elv alapján, illetve laser sugár abszorpciója útján. Az atmoszféra vizsgálata különlegesen aktuálissá vált a légkör egyre növekvő szennyezettsége miatt.

S. H. Melfi cikkében (Remote Sensing for Air Quality Management) röviden vázolja a légkör szerkezetét, a levegőbe kerülő természetes és mesterséges gáz és szilárd szennyezők eredetét és a levegőben való terjedésüket. Foglalkozik az ezen szennyezők között lejátszódó fotokémiai reakciókkal és azok következményeivel. Összefoglaló képet ad a laseres szennyezés detektálás különféle módszereiről és azok előnyeiről más módszerekkel összehasonlítva.

V. E. Zuev: „Laser Light Transmission Through the Atmosphere” című cikkében az alap kölcsönhatási folyamatok — abszorpció, szórás, Raman szórás stb. — után tárgyalja a fénynek a különféle légköri képződményeken keresztül való terjedését, szóródását, mely lehetővé teszi ezen objektumoknak laseres vizsgálatát.

A LIDAR mérésekről és a differenciális abszorpciós visszaszórás mérésekről R. T. H. Collis és P. B. Russel írta az összefoglaló cikket. Különösen jelentős az utóbbi módszer, hiszen a két hullámhosszon mért lidarjelből nemcsak a légköri objektum helyét és sűrűségét lehet megállapítani, hanem azt is, hogy milyen atomok alkotják. Hozzá kell még tenni, hogy a módszer igen érzékeny is, hiszen például  $\text{SO}_2$  gázból a minimálisan detektálható koncentráció 0,04 ppm atmoszféra nyomás mellett. A cikk élvezhető stílusban ismerteti az ezen a területen elért impozáns eredményeket.

A lidar mérések közül a legérzékenyebb, a vizsgálni kívánt szennyező gázra szelektív eljárásokról, a Raman és rezonancia fluoreszcenciás visszaszórásos mérésekről H. Inaba írt igen jó ismertetőt. Ez az a terület, ahol a modern kis sávzélességű nagy intenzitású hullámhosszú, hangolható impulzus lasereknek igazán nagy hasznát lehet venni, különösen akkor, ha ezen lasereknek az impulzus ismétlési frekvenciája is nagy. Valóban impozánsak az elért eredmények is. Nagy benyomást tesz, hogy a föld felszínéről a 100 km magasan elhelyezkedő nátrium felhő, melynek sűrűsége csupán  $10^9$  atom/cm<sup>3</sup> mérhető, mozgása nyomon követhető. A cikk a nem a közvetlenül ezen a területen dolgozó szakember részére is élvezetes olvasmány.

A laseres atmoszféra vizsgálatokban használt laserekről és sugárzás detektálási módszerekről E. D. Hinkley R. T. Ku és P. L. Kelley írta az összefoglalót, míg a legérdekesebb hullámhosszra szelektív és a laserek megjelenéséig csupán a rádiótechnikában használt detektálási módszerről, a szuperheterodin detektálásról R. T. Menzies írta élvezetes, kompakt, jól sikerült összefoglalóját.

*Bakos József*

**A. Rosenfeld (ed.): Digital picture analysis**

**Topics in Applied Physics Vol. 11  
Springer-Verlag, 1976**

A cím érdeklődést keltő. A mérés- és számítástechnika egyik legizgalmasabb területét jelzi, mind gyakorlati, mind tudományos szempontból. A könyv öt alkalmazásról ad számot, és a szakma kiváló művelői írták az egyes fejezeteket. Ezek a következők:

1. Távolsági érzékelés (légi felvételek) automatikus feldolgozása.



2. Radiográfiás képanalízis.
3. Képfeldolgozás a nagyenergiájú fizikában.
4. Digitális képanalízis a citológiában.
5. Képanalízis és karakter felismerés.

Közös az öt fejezetben a képfeldolgozás szükségességének meghatározása az adott területen a hardware és software követelmények ismertetése és a bőséges irodalomjegyzék. Természetesen különbségek is adódtak a feladatok természetétől, a módszer fejlődésétől, valamint az írók személyes érdeklődésétől és stílusától függően. Ezeket a szerkesztő nagyon rövid bevezetője igyekszik keretbe foglalni.

Az automatikus képanalízis célja többféle lehet:

1. Képek összehasonlítása például változások észlelése érdekében, vagy meghatározott objektumok helyének megállapítása három dimenzióban.
2. A kép osztályba sorolása vagy leírása adott jellemzők egy csoportja alapján.
3. A kép szénbontása az analízis szempontjából érdekes részekre.
4. A kép felismerése egymással speciális kapcsolatban levő meghatározott részei alapján.

Nyilvánvaló a célkitűzések más és más súllyal szerepelnek az egyes közleményekben, amelyek a módszerekről is tájékoztatást adnak.

A távérzékelés nem csak a klasszikus fényképezést jelenti. A spektrum analizátorok, az infravörös, rádiófrekvenciás, gammasugárzás és radar scannerek szintén használatosak. A felhasználók (a kívánt adatok és az alkalmazás táblázatos felsorolásával) a mező- és erdőgazdaság, a vízgazdálkodás, a geológia, a földrajztudomány és a környezetvédelem. Az analízis a téma természeténél fogva a valószínűség és döntéshelmélet magas szintű alkalmazását igényli.

A radiográfiás képanalízis fejezet szerzői saját laboratóriumuk munkájáról számolnak be. A kutatási stratégiájuk nem a röntgenképek „feljavítása” a jobb emberi kiértékelés céljára, hanem körülhatárolt területeken automatikus diagnosztikai módszerek kidolgozása. Bátor vállalkozás, de a röntgenfelvételek számának rendkívüli növekedése miatt indokolt is.

A módszerek leírása után több alkalmazást ismertet a fejezet, és sok összehasonlító táblázatot láthatunk a számítógépes és a verifikált diagnózisok számszerű adataival.

Az automatikus analízis a nagyenergiájú fizikában ismét más feladatot jelent. A módszerek legtöbbje a legnagyobb térbeli feloldású és magas zajszintű buborékkamrák képanalízise céljára lett kifejlesztve. A fejezet részletesen foglalkozik az elméleti és kivitelezési kérdésekkel. A részecskenyomokról felvett két vagy több sztereoszkopikus filmen először az érdekes eseményeket kell megtalálni. A térképezés többféle szempont szerint történhet, és lényeges eleme a zavaró nyomokra való eltérés korrigálása. Az automatikusan készített lista alapján a kiválasztott nyomok mérése következik. Ez a legidőigényesebb munka. Kézzel végezve 3–10 esemény értékelhető óránként, automatikus géppel 150. A digitálisan tárolt képek illesztése, ellenőrzése, válogatása és térbeli felépítése szintén automatikusan végezhető.

A sejttani alkalmazások kutatására fordítják valószínűleg a legnagyobb erőfeszítéseket. Az 1–100  $\mu\text{m}$  átmérőjű tartományba eső sejtek vizsgálatával (amelynek klasszikus eszköze a mikroszkóp) csak az USA-ban 20–40 000 patológus, hematológus és genetikus foglalkozik.

A feladat lényegében előkészített, színezett sejtek alkotóelemek osztályba sorolása típusuk, koruk és patológikus állapotuk szerint.

A történeti áttekintés után a fejezet szerzője a jelen törekvéseket vizsgálja (előkészítés, scanning módszerek, mérési eljárások, osztályozás, jegyzőkönyvkészítés).

A záró fejezet az alfanumerikus karakterek automatikus felismerésével foglalkozik. Írója a téma helyzetéről akar áttekintést nyújtani. A hardware eszközökről számol be először (scannerek), majd a fekete-fehér megkülönböztetés, simítás, szétválasztás és normalizáció eljárásairól. A felismerési módszerek közül a korrelációt, Boole algebrát tárgyalja. A zavart karakterek analízisének tárgyalása már a kézírás felismerés területére visz át.

Aki nem ismeri a szakterületet, először az automatikus képanalízis célkitűzéseit keresi a könyvben, majd mint a kíváncsi detektívregény-olvasó a fejezetek végére lapoz, hogy az eredményeket és a záró megjegyzéseket ismerje meg. Befejezésül ezekből emelünk ki egy-két gondolatot:

- ... reméljük elég betekintést adtunk az automatikus adatfeldolgozás világának elveibe és szótárába ahhoz, hogy egy kutató olvasni és érteni tudja a távolsági érzékeléssel foglalkozó közleményeket ...;
- ... a radiográfiás képanalízis még gyerekcipőben jár, ...előreláthatóan fejlődése evolúciós folyamat lesz;
- A jelenlegi helyzetről elmondható, hogy az ember a karakter formák sokkal szélesebb változatait



képes felismerni, mint az ismert gépek. Sok év erőfeszítése után ez a rés még mindig olyan széles, hogy kételkedni lehet abban, hogy egy evolúciós fejlődés ezt képes megoldani az alap kutatás segítségével.

A könyv jó kiindulópont azoknak, akik abban a munkában részt kívánnak venni.

(H. P.)

**M. Ueta és Y. Nishina: Physics of Highly Excited States in Solides**

**Lecture Notes in Physics 57.  
Springer-Verlag, 1976**

A könyv a Tomakomaiban (Japán) 1975. szeptember 9—13. között tartott Oji szemináriumon 36 kutató által tartott előadásokat tartalmazza, melyek a következő csoportokra oszthatók: Exciton molekulák, exciton kondenzálás, fázisátalakulás, elektron-lyuk cseppek, fényszóródás, gerjesztett fotolumineszcencia, nemlineáris optika.

Az előbbi felsorolás elegendő információt nyújt ugyan az előadások aktualitása szempontjából, mégis érdekesnek tartom ismertetni, hogy a vizsgálatok milyen anyagokon folynak. Tíz esetben germánium, öt esetben kadmium-szulfid, háromban rézklorid, kettőben rézbromid, ill. szilícium, egy-egy dolgozatban AgBr, TiCl, TiBr, ZnO, GaSe a vizsgálat tárgya.

A kísérleti körülmények általában: 1—2 K hőmérséklet, mikrohullámú technika, deformálás, ciklotron rezonancia, laser és a „szokásos” lumineszcens és elektromos mérések.

Érdekes, hogy L. V. Keldis 1968-ban Moszkvában a 9. nemzetközi félvezető konferencián tartott előadása egyike a legtöbbet idézett dolgozatnak, pedig amint a következő statisztika mutatja, a megjelent kutatók munkahely szerinti megoszlásából ez nem volna várható: 41 fő Japán, 9 NSZK, 6 USA, 3 francia, 2 svájci, 1-1 dán, ausztrál, indiai, NDK. Érdekes, hogy míg az NSZK mint Fed. Rep. Germany, az NDK DDR elnevezéssel szerepel.

(T. Gy.)

**F. K. Fong (szerk.): Radiationless Processes in Molecules and Condensed Phases**

**Topics in Applied Physics 15. kötet  
Springer-Verlag, 1976**

A könyv szisztematikusan tárgyalja a címben megnevezett folyamatokat, közelebbről gázállapotban végbemenő molekuláris relaxációkat, aktív molekuláknak vagy molekula aggregátumoknak idegen rácsban való relaxációját, ritkaföldfém ionok között kristályban végbemenő energiaátvitteleket, energia vándorlást, elegykristályokban molekuláris fotodisszociációkat, elektromosan és akusztikailag gerjesztett molekulák relaxációját, aktivált folyamatok sebességét, szilárdtestben végbemenő sokfotonos folyamatokat és a fotoszintézis primér folyamatait.

A könyv anyagszerkezetkutatók, szilárdtest fizikusok és fizikai kémiai kutatók számára készült. Igyekszik egyensúlyt tartani az elmélet és a kísérlet között. Így az olvasó megtalálhatja benne mind az aktuális kísérleti munkák felsorolását, mind a relaxáció elméletének legutóbbi megállapításait. Központi témául a kísérleti viselkedés szolgál adiabatikus közelítésben, mert ebben a relaxációs folyamatért felelős fizikai mechanizmusok kétségtelenül azonosíthatók. A legfőbb cél a széteső anyag összetartása és a szilárdállapotú és a molekuláris jelenségeknek egyetlen elméleti és kísérleti keretbe való helyezése.

(T. Gy.)

**S. Bashkin (ed.): Beam foil spectroscopy**

**Topics in Current Physics  
Springer-Verlag, 1976**

Bármely pozitív ionokat gyorsító berendezés használható a BFS céljaira. 1963-ban a Phys. Letter-ben jelent meg L. Kay kísérleteinek első publikációja. 1964-ben a Nucl. Instr. and Meth.-ban S. Bashkintól származik az új kísérleti módszer lehetőségeinek első diszkussziója. A könyv célja kísérleti és elméleti fizikusok között terjeszteni ezt az új kutatási eljárást. Ezért a fólia készítés mód-



jának részletes leírásából, a már használható (néhány száz keV) energiáknál kapott eredményeket az extrém felső (8–10) MeV energia tartományban létrejövő egészen új jelenségeket bemutatja. A kötet említett feladata hozza magával, hogy a szerkesztő nemcsak a már elvégzett munkákat ismerteti, hanem rámutat a további lehetőségekre.

Így azután először azok a nehézségek kerülnek tárgyalásra, amelyeket a Baschkin által megjósolt, Doppler hatás által létrejött vonalkiszélesedés okoz, és egyúttal megismerkedünk az ezt csökkenteni tudó módszerekkel. A különböző berendezések, gyorsítóktól a spektrométerekig előnyei és korlátai is a könyv elején kerülnek ismertetésre.

A második fejezet összefoglalja, hogy mi várható a spektroszkópiától magától. Külön kiemeli a gerjesztett elektronállapotok átlagos élettartama meghatározásának lehetőségét. Ezekhez a gondolatokhoz csatlakozik a harmadik fejezet is.

Míg a kísérleti munka felvirágozott, fontos fejlődésnek ment az elmélet, különösen az oszcillátor erősség meghatározása területén.

A következő fejezet az előzőekben említett elméleti kérdések további távlatait ismerteti, míg az utolsó kettő asztrológiai alkalmazásokat mutat be.

A könyvet áttanulmányozva megállapíthatjuk, hogy a nyaláb-fólia forrás az egyatomos rendszerek megismerésének gazdag forrása.

(T. Gy.)

#### Joachim Kessler: Polarized Electrons

Tests and Monographs in Physics  
Springer-Verlag, 1976

A könyv a polarizált spinű szabad elektronokkal foglalkozik. Az elektron együttest akkor mondjuk polarizáltnak, ha az elektron spineknél kitüntetett iránya van úgy, hogy létezik egy irány, amelyre nézve a két lehetséges spinállapot nincs egyformán betöltve.

Eddig ennek a gyorsan terjedő területnek sok vonását tárgyalták már összefoglaló cikkek, de ez az első önálló monográfia a témában. Előnye, hogy kézikönyv formájában készült, célja, hogy ne csak a témában jártasak forgassák haszonnal. Ez azt is jelenti, hogy pl. a Dirac-elmélet egyszerű tárgyalása után kerül sor a Mott-szórásra, a polarizált elektron kutatásban legfontosabb technikák egyikére. Ugyanebből a célkitűzésből következik, hogy ez a monográfia csak egy bevezetés, és nem kívánja helyettesíteni a speciális területeket tárgyaló összefoglaló cikkeket. Ezért nem foglalkozik pl. a sugárzásnál fellépő polarizációval, s az elektronspinrezonanciával, ahol nem a *szabad* elektronok spinjei vannak orientálva. Tárgyalásra kerül viszont a nempolarizált targeten fellépő elektron szóródás, az elektronszere által kiváltott folyamatokkal, az ionizációs folyamatokban fellépő számos spinpolarizációs hatással és a szilárd testekben végbemenő elektron polarizációval együtt.

(T. Gy.)

#### D. Kamke—K. Krämer: Physikalische Grundlagen der Masseinheiten Teubner Studienbücher. Stuttgart, 1977

Sok fizikus, fizikatanár számára csak nagyon távolról érdekesek a mértékegységek. Esetleg csak bosszúságokat jelent a mértékegységek sokszor nem is lassú, de szinte állandó változtatása. A különböző nemzetközi bizottságok, így a IUPAP S. U. N. bizottsága részben a fizikán belül, részben a rokon tudományokkal karöltve törekszik rendet teremteni a már-már áttekinthetetlen helyzetben. Nyilvánvaló, hogy a mértékegységek fizikai alapjainak ismerete megkönnyíti az alapegységek kiválasztásának megértését. A változtatások kevésbé lesznek idegenek, ha tudomásunkba vessük: a mértékegységek nem képeznek merev rendszert, hanem a mérés technika minden megjavulása, valamint új jelenségek felfedezése az alapegységek új meghatározásához vezethet.

A régi, mértékegységekhez vezető kísérletsorozatok élvezetes tárgyalása épp úgy értéke ennek a kis könyvecskének, mint az 1962-ben publikált, a feszültségmérést nagyon pontosan végrehajtható frekvenciamérésre visszavezető Josephson-effektus ismertetése. A tárgyalást kiegészítő négy függelék: elemi hibaszámítás, a leszámított egységek, valamint átszámításai táblázata, egyes általános fizikai állandók táblázata, az atomfizika energiavonatközlései mind értékes részei ennek a kis könyvecskének.

(T. Gy.)



**F. Kasch: Moduln und Ringe  
B. G. Teubner. Stuttgart, 1977**

Az a gondolat, hogy pár év alatt minden tudás elavul, részben a matematikusra is érvényes. Szükség van tehát olyan könyvekre, amelyek a tudomány új ágait nemcsak egyszerűen ismertetik, hanem amelyek önálló tanulásra, továbbképzésre is lehetőséget adnak. Kasch ezt az igényt törekszik kielégíteni. Reméli ezáltal e területek, esetünkben a teljes dualitású gyűrűk és a kvasi-Frobenius gyűrűk továbbfejlődését. Ehhez igazodik a tárgyalási mód is, mely a legegyszerűbb alapfogalmakból kiindulva jut el a kérdésfeltevésig és felvázolja az aktuálisan érdekes tudományos fejlesztésre vonatkozó megfontolásokat. Így szerepelnek azután különböző nehézségű feladatok, amelyek nemcsak a tárgyalt anyag begyakorlására szolgálnak, hanem olyan fogalmakat és fejlődési irányokat érintenek, amelyeket a könyv explicite nem tárgyal.

A szerzőnek az a meggyőződése, hogy a projektív és injektív modulus fogalma adja a modulusok és gyűrűk elméletének alapfogalmait. Ezért ezzel már kezdettől foglalkozik és már felhasználja az elmélet klasszikus részeinek tárgyalásakor. Ugyanígy tesz a generátor és kogenerátor alapfogalmakkal, s bizonyos határértékfeltételekkel is.

A megértést elősegíti a szerző nagy oktatási tapasztalata, a didaktikus felépítése, az a körülmény is, hogy helyenként az ismétléstől sem riad vissza, és többször nem csak egy bizonyítási módot mutat be.

(T. Gy.)

**W. Velte: Direkte Methoden der Variationsrechnung**

**Teubner Studienbücher. Stuttgart, 1976**

A könyv a parciális differenciál egyenletek szélső érték problémáira való tekintettel kíván a fenti címmel egy bevezetést adni. A variációs számítás módszerei a szélső érték, a maximum—minimum problémák megoldásának fontos segédeszköze. Jó példák erre a kontinuum-mechanikai és a matematikai fizika számos kérdése. Ezeknél elsősorban a parciális differenciálegyenletek szélső érték feladatai az érdekesek, ezért szorítkozik az alkalmazásokban erre a területre ez a könyvecske.

Ezen általános elveken belül a szélső érték problémák numerikus kezelésére szolgáló variációs számítás módszerei állnak előtérben, beleértve a hibabecslés kérdését is. Ez utóbbinál a komplementer maximum—minimum probléma párok fontos szerepe részletes tárgyalásra kerül. Ebben a szellemben kerül sor, ha nem is a legnagyobb általánosságban a megoldások létezésének, azoknak a megfelelő függvényeknek tárgyalása, amelyekben működni kell.

A tárgyalás felépítése ezek alapján a következő. Általános alapok (lineáris terek, operátorok, szélső értékfeladatok) után a lineáris szélső érték problémák esetén fellépő kvadratikus maximum—minimum kérdések (a négyzetes hiba és energia módszerek lineáris operátor egyenletek esetében, négyzetes maximum—minimum problémák lineáris variációegyenletekben), ezután a numerikus stabilitás és konvergencia kérdése következik, majd komplementer maximum—minimum problémák különböző alkalmazásaikkal együtt (egy kondenzátor térenergija és kapacitása, rugalmas rúd torziója, Castigliano-elv rugalmas testek esetén stb.), lineáris szélső érték feladatok megoldásainak határfeltételei és nem lineáris problémák.

(T. Gy.)

**J. Weidmann: Lineare Operatoren in Hilberträumen**

**B. G. Teubner. Stuttgart, 1976**

Matematikusok, fizikusok, híradástechnikusok magasabb évfolyamú egyetemi hallgatóktól egyetemi docensekig, de a már gyakorlatban dolgozó szakemberek is örömmel üdvözlrik Weidmann munkáját, melynek megértésében a függvénytan és a közösleges differenciálegyenletek elméletének csak viszonylag egyszerű alapismerete szükséges. A Lebesgue-féle integrálmélet a tárgyalás követéséhez szükséges legfontosabb eredményeit maga Weidmann ismerteti; az általános függvényanalízis idevágó eredményei pedig csak éppen bemutatásra kerülnek. Az ortogonális és az önadjungált fogalmak ezáltal egészen világosan tisztázódnak. Az önadjungált operátorok spektráltétele és ennek alkalmazásai képezik a könyv súlypontját. A legtöbb eredményt részletesen kidolgozott példák még jobban megvilágítják. Ezeken kívül számos gyakorlásra szolgáló feladat könnyíti meg az elmélyülést, ill. a megértés kontrollját vagy az anyag begyakorlását, gyakran pedig burkoltan újabb ismereteket nyújtanak. Mivel ezek a feladatok különböző nehézségűek, közülük sok részletes utasítással van ellátva.

(T. Gy.)



**D. Kaletsch: Programmierung mit PL/1****Teubner Studienskripten Stuttgart, 1976**

A PL/1 (Programming Language one) olyan magas szintű, ún. problémaorientált programnyelv, mely bonyolult algoritmusok kényelmes beprogramozására és nagyméretű adatrendszerek kezelésére egyaránt alkalmas. Tehát egyesíti a legismertebb programnyelvek: ALGOL, FORTRAN, COBOL tulajdonságait. A PL/1-et 1964 és 1967 között dolgozták ki, a számítógépek típusától függetlenül alkalmazható.

A Műszaki Könyvkiadó Rákosi Miklóstól 1974-ben jelentetett meg „A PL/1 programozási nyelv” cím alatt egy közel 500 oldalas kis formátumú könyvet, — D. Kaletsché szintén kis formátumú kb. 150 oldalas munka. A két könyv nem fedi, hanem bizonyos tekintetben kiegészíti egymást. A Programmierung mit PL/1 a dortmundi egyetem számítógépközpontja által vezetett, az egyetem valamennyi szakirányának hallgatói számára szóló előadássorozatot tartalmazza. Így azután nem tételez fel programozási előismereteket, célja a számítógépes programozás lényegének megértése a PL/1 nyelv ismertetésén keresztül. Rákosi és Kaletsch könyvének ezen célkitűzés szerinti eltérése azonos tárgyuk ellenére biztosítja egyedi értéküket, amely érdekesen tükröződik abban is, hogy az általuk ajánlott irodalomban egyetlen azonos sincs.

Időközben a Teubner kiadó eljuttatta a Magyar Fizikai Folyóirat szerkesztőségébe Kaletsch könyvének hibajegyzékét is. Nem öröm az ily sok hiba, de a jegyzék összeállítása mutatja, milyen sokan tanulmányozzák gondosan ezt a magántanulásra is alkalmas könyvecskét.

(T. Gy.)

**J. J. Benedetto: Real Variable and Integration  
(with Historical Notes)****B. G. Teubner. Stuttgart, 1976, 278 o.**

Milyen egy jó és vonzó valós függvénytan bevezető előadás? Tartalmát illetően eléggé kialakult az az anyag, amelyre a továbblépéshez, a matematika más ágaiban, elsősorban a funkcionál-analízisben és a valószínűségszámításban való alkalmazásokhoz szükség van. Jelen kézikönyv, amely írójának a marylandi egyetemen tartott egyéves kurzusai anyagát tartalmazza, tartalmában nem tér el a szokásostól. Felépítésében már igen, mert bár a klasszikus Lebesgue-féle felépítést követi, mégis a Lebesgue-mérték és integrál fő érdemének a határérték és integrálás felcserélésére vonatkozó Lebesgue-tételt, valamint az integrálás és differenciálás szimmetriáját helyreállító Vitali- és Radon—Nikodym-tételeket tartja (és ez a vélemény jogosult). Ezzel már meg is mondtuk, mi alkotja a könyv magvát. Valószínűségszámításbeli alkalmazások szempontjából hasznos a mértékek gyenge konvergenciójáról szóló fejezet. Három függelék is található, metrikus és Banach-terekről, a Fubini-tételről és Riesz reprezentációs tételéről. A könyv valóban jó bevezetés a valós függvénytanba, s hogy emellett vonzó is, az a helyenként izgalmas történeti megjegyzések, a legújabb eredményekre való utalások, és a számos érdekes példa és feladat következménye. Bár analízisből csak elemi ismereteket tételez fel, mégis általános fogalomköre és a példákhoz szükséges ismeretanyag miatt a felsőbbéves igényes hallgatóknak és természetesen kutatóknak ajánljuk.

Sz. D.

**M. Mehring: High Resolution NMR Spectroscopy in Solids****(NMR, Basic Principles and Progress sorozat 11. kötete)  
Springer-Verlag, 1976**

A hatvanas évek végén a szupravezető mágnesek bevezetésével a nagy térerősségek (50—70 kG), fokozott homogenitás és stabilitás elérése révén nagyfelbontású NMR spektrumok felvétele vált lehetővé. Ahhoz azonban, hogy ez az új technika a szilárdtestfizikában alkalmazható legyen, ötletekre volt szükség.

Míg a folyadékokban valamennyi anizotróp kölcsönhatás kiátlagolódik a gyors molekulamozgás következtében, addig szilárdtestekben a bonyolult és sokféle anizotróp kölcsönhatás következ-



tében gyakran egyetlen, strukrurálatlan, széles vonal az eredmény, amelyből kevés információ nyerhető. A cél tehát az volt, hogy valamilyen „fortélyal” a nemkívánt dipól és kvadrupól kölcsönhatásokat elnyomják, ugyanakkor a többi, gyengébb kölcsönhatást érintetlenül hagyva az immár strukturált jelekből a megmaradó kölcsönhatások természetére következtessenek.

M. Mehring műve azokat az új módszereket (a minta forgatásának módszere, hígtott spinrendszerek alkalmazása, többimpulzusos NMR, kettősrezonancia, keresztpolarizációs kísérletek, spinrács relaxáció a vonalkeskenyedési kísérletekben) ismerteti, amelyeket a 60-as évek végén, a 70-es években dolgoztak ki, és azáltal, hogy a nagyfelbontású NMR spektroszkópia alkalmazhatósági körét a szilárdtestfizikára is kiterjesztették, az NMR spektroszkópia szilárdtestfizikabeli megújulásához vezettek. A mű témája tehát rendkívül időszerű. Minden NMR-rel foglalkozó szilárdtestfizikus számára hasznos lesz, annál is inkább, mivel ebben a témakörben ez az első összefoglaló könyv.

W. A.

### Miklós Kocsics: High-speed Silicon Planarepitaxial Switching Diodes

Akadémiai Kiadó. Budapest, 1976

A könyv a félvezető diódák nagysebességű kapcsolótulajdonságainak javítása érdekében alkalmazott technológiai kérdéseket tárgyalja.

A tárgyalás érdekében általában foglalkozik a félvezető kapcsolódiódák átmeneti folyamataival, majd rámutat, hogy az egyes technológiai módszerek hogyan befolyásolják ezeket a folyamatokat.

Részletesen tárgyalja az arany adalék hatását, a felépítés és az elektromos paraméterek összefüggését. Kitér a mesa, planár felépítésű eszközökre és az epitaxia alkalmazásának előnyére. Gondosan megvizsgálja az impulzusformálásra optimálisan alkalmas töltéstároló dióda kialakításának lehetőségét. Tárgyalja a „forró elektron” dióda (Shottky) felépítését, előnyeit. Nem foglalkozik a félvezetődiódák „negatív ellenállású szakaszt” megvalósító típusaival.

A könyv a kapcsoló félvezetődiódák mérés technikájával zárul. Részletes irodalomjegyzék és a név és tárgymutató használhatóságát, értékét emeli.

Hasznosan olvashatják a félvezető gyártás-technológusok, villamosmérnökök. Kítűnő segédkönyv főiskolai és egyetemi oktatásban. Gondolatébresztő lehet szilárdtestfizikával foglalkozó szakemberek számára.

(M. B.)

### Sohár Pál: Mágneses magrezonancia-spektroszkópia

Akadémiai Kiadó. Budapest, 1976

Az NMR spektroszkópia felfedezése (1946) óta rendkívüli fejlődésen ment keresztül, és ennek révén nem maradt csak a fizikusok és vegyészek alapvető technikája, hanem tért hódított a biológiában, orvostudományban, gyógyszerészetben, sőt a kriminalisztikában is. A módszer jelentősége nagyon is indokoltá tette, hogy végre magyar nyelven is megjelenjen az első NMR tárgyú mű.

Sohár Pál a szerves vegyész igényeit tartva szem előtt, a témakör 30 éves múltja, gazdagsága miatt kénytelen volt lemondani az egész NMR spektroszkópiát felölelő teljesség igényéről, így azonban lehetősége nyílt, amivel élt is, hogy mindenkor tudományos alapossággal nyúljon témájához. Éppen Magyarországon, ahol az NMR spektroszkópusok jelentős hányada szerves vegyész, ez a szelekció nagyon is indokolt.

A könyv első része az NMR elmélet rövid ismertetése. A szerző szándékosan egyszerűbb matematikai és kvantumkémi ismereteket feltételezve, szemléletes ábrák segítségével világítja meg az alapokat. Így várhatóan nemcsak a szerves kémikusok, fiziko-kémikusok, hanem a biológusok, orvosok és gyógyszerészek is haszonnal forgathatják e könyvet.

A második rész első harmada a legnagyobb múlttal rendelkező protonrezonancia-spektroszkópiát taglalja. A módszer, amely igen érzékeny, és annak következtében, hogy a szerves vegyületek nagyszámú hidrogénatomot tartalmaznak, jelentős perspektívával rendelkezik.



A második harmad egyéb magok rezonanciaspektrumát ismerteti. Bár a  $^{13}\text{C}$ ,  $^{14}\text{N}$ ,  $^{15}\text{N}$ ,  $^{17}\text{O}$ ,  $^{19}\text{F}$ ,  $^{31}\text{P}$  magoknak a protonhoz viszonyított relatív érzékenysége kicsiny, az NMR spektrométerek érzékenységeinek növekedése és a modern elektronika utóbbi időben bekövetkező fejlődése következtében lehetségessé vált ezen magok rezonanciájának mérése is, amely új oldalról szolgáltat adatokat az anyag szerkezetének megismeréséhez. A harmadik harmad a mérőberendezések rövid ismertetése (használó tárgyu könyvekben gyakran adnak egy-egy blokksemát, itt is informatív lett volna), felvételi technikák leírása (minden gyakorló NMR spektroszkópus számára elengedhetetlen ismeretük), valamint különleges mérési eljárások ismertetése, amely a legmodernebb módszereket is tartalmazza (pl. Fourier-transzformációs NMR).

A harmadik rész szerkezetmeghatározási feladatokat tartalmaz, amelyhez jól összeállított és hasonló tárgyu könyveknél hallatlanul gazdagabb spektrumgyűjtemény járul.

(W. A.)

L. Pál—P. Szépfalusi (editors): Statistical Physics

Proceedings of the International Conference, 25—29 August, 1975 Budapest,  
Akadémiai Kiadó. Budapest, 1976

Dicséretes gyorsasággal adta ki az Akadémiai Kiadó — a North—Holland Publishing Company-val közösen — a nemzetközi Statisztikus Fizikai Konferencia felkért előadóinak előadásait. (A konferencián elhangzott előadások kivonatait már korábban közre adta az Akadémiai Kiadó és az MTA Központi Fizikai Kutató Intézete.)

A konferencia a Nemzetközi Elméleti és Alkalmazott Fizikai Unió (IUPAP) által két-három évenként megrendezett statisztikus fizikai konferenciák sorába tartozott, így az volt a feladata, hogy áttekintést adjon a tudományág legújabb eredményeiről. A statisztikus fizika centrális témája napjainkban a fázisátalakulások, ill. általánosabban az instabilitások elmélete. Nem meglepő tehát, hogy az ún. „nagy” előadások — de általában a konferencián elhangzott előadások — nagyobbik fele közvetlenül vagy közvetve ehhez a témához kapcsolódott.

Íme a kötet tartalomjegyzéke: P. Szépfalusi: Preface; L. Pál: Opening Address; K. G. Wilson: The Renormalization Group and Block Spins; N. G. van Kampen: Fluctuations in Closed and Open Non-Linear Systems; H. Haken: Statistical Theory of Self — Organizing Structures; P. C. Martin: The Onset of Turbulence: A Review of Recent Developments in Theory and Experiment; L. P. Kanadoff et al.: Variation Approximations for Renormalization Group Transformations; Ja. G. Sinai: Some Rigorous Results in the Theory of Phase Transitions; A. A. Abrikosov: Excitonic Transitions in a Strong Magnetic Field; B. I. Halperin: Theory of Dynamic Critical Properties; P. Résibois: Kinetic Theory of Hard Spheres Close to Equilibrium; G. Jona-Lasini: Critical Behaviour of Stationary Random Fields; K. Binder: Statistical Mechanics of Nucleation and Phase Separation.

A konferencián adták át első alkalommal az L. Boltzmannról elnevezett aranyérmet; első kitüntetettje Kenneth G. Wilson (Cornell University).

A kötet sok és rendkívül hasznos információt nyújt mindazok számára, akik a statisztikus fizika iránt érdeklődnek, ill. főbb fejlődési irányairól, legújabb eredményeiről tájékoztatást, áttekintést akarnak kapni.

Szabó János

Technikai szerkesztő Turchányi György

A kiadásért felelős az Akadémiai Kiadó igazgatója — Műszaki szerkesztő: Agócs András

A kézirat beérkezett: 1977. II. 23. — Terjedelem: 8 (A/5) ív

77-897 — Szegedi Nyomda — F. v.: Dobó József

MAGYAR  
TUDOMÁNYOS AKADEMIA  
KÖNYVTÁRA

A MAGYAR  
TUDOMÁNYOS AKADÉMIA  
MATEMATIKAI ÉS FIZIKAI TUDOMÁNYOK  
OSZTÁLYÁNAK

# KÖZLEMÉNYEI

Matematikai, fizikai, csillagászati dolgozatokat, referátumokat, könyvismertetéseket, a Tudományos Minősítő Bizottságnak a III. Osztályra vonatkozó híreit s a III. Osztály híreit közli. Évenként egy kötet (kb. 40 ív) jelenik meg (négy szám alkot egy kötetet).

A Közlemények előfizetési ára kötetenként, azaz évenként 60 Ft. Belföldi megrendelések az Akadémiai Kiadó, 1363 Budapest V., Alkotmány u. 21. Pénzforgalmi jelzőszámunk 215-11 488, külföldi megrendelések a „Kultúra”

Könyv- és Hírlap Külkereskedelmi Vállalat,

1011 Budapest I., Fő utca 32.

Pénzforgalmi jelzőszám: 218-10 990 útján eszközölhetők.



## TARTALOMJEGYZÉK

<i>Vincze Gyula</i> : Hozzászólás Nagy Károly „Variációs elvek a fizikában” című cikkéhez. . . . .	193
<i>Valkó János</i> : A pulzált neutronforrás segítségével történő reaktivitás meghatározás néhány módszerének vizsgálata . . . . .	199
<i>Csoma Zsigmond</i> : Egyenletes tömegeloszlású tér metrikájának előállítása téregyenletek nélkül . . . . .	271

## KÖNYVISMERTETÉSEK

<i>L. B. Felsen</i> : Transient Electromagnetic Fields. . . . .	275
<i>R. Glowinski, J. L. Lions</i> : Computing Methods in Applied Sciences . . . . .	275
<i>Landolt-Börnstein</i> : Gleichgewicht der Absorption von Gasen in Flüssigkeiten; Absorption in Flüssigkeiten von niedrigem Dampfdruck . . . . .	276
<i>A. W. Thomas (editor)</i> : Modern Three-Hadron Physics . . . . .	276
<i>E. D. Hinkley (ed.)</i> : Laser Monitoring of the Atmosphere . . . . .	277
<i>A. Rosenfeld (eds.)</i> : Digital Picture Analysis . . . . .	277
<i>M. Ueta és Y. Nishina</i> : Physics of Highly Excited States in Solides . . . . .	279
<i>F. K. Fong (ed.)</i> : Radiationless Processes in Molecules and Condensed Phases . . . . .	279
<i>S. Bashkin (ed.)</i> : Beam foil spectroscopy . . . . .	279
<i>J. Kessler</i> : Polarized Electrons . . . . .	280
<i>D. Kamke—K. Krämer</i> : Physikalische Grundlagen der Masseinheiten . . . . .	280
<i>F. Kasch</i> : Moduln und Ringe . . . . .	281
<i>W. Velte</i> : Direkte Methoden der Variationsrechnung . . . . .	281
<i>J. Weidmann</i> : Lineare Operatoren in Hilberträumen . . . . .	281
<i>D. Kaletsch</i> : Programmierung mit Pl/1 . . . . .	282
<i>J. J. Benedetto</i> : Real Variable and Integration . . . . .	282
<i>M. Mehring</i> : High Resolution NMR Spectroscopy in Solids . . . . .	282
<i>Miklós Kocsis</i> : High-speed Silicon Planarepitaxial Switching Diodes . . . . .	283
<i>Sohár Pál</i> : Mágneses magrezonancia-spektroszkópia . . . . .	283
<i>L. Pál—P. Szépfalussy (editors)</i> : Statistical Physics . . . . .	284

✓ 307.226

✓ IV

*v*

# MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

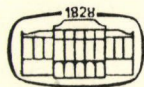
A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA  
III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

KOVÁCS ISTVÁN, NAGY ELEMÉR,  
PÁL LÉNÁRD ÉS SZALAY SÁNDOR  
KÖZREMŰKÖDÉSÉVEL

SZERKESZTI  
JÁNOSSY LAJOS

XXV. KÖTET

4. FÜZET



AKADÉMIAI KIADÓ  
MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA  
BUDAPEST 1977

2



# MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

## A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

KIADÓHIVATAL: 1363 BUDAPEST V., ALKOTMÁNY UTCA 21. SZ.

A Magyar Fizikai Folyóirat a magyar fizikus kutatók lapja. A lap célja a magyar fizikai kutatás korszerű szinten való támogatása, elsősorban összefoglaló jellegű cikkek, tanulmányok stb. közlése által. Ilyen dolgozatok megjelentetésével a lap tájékoztatást kíván nyújtani a fizika különböző kutatási területeinek jelenlegi eredményeiről, problémáiról, további célkitűzéseiről. A lap „A klasszikus irodalomból” című rovatában rendszeresen közöl egy-egy téma köré csoportosított, immár klasszikussá vált cikkeket, amelyek a témakör befejezése, átlagosan 10–10 dolgozat megjelenése után a folyóiratfüzetekről leválasztva, az alsó lapszámozás szerint összekötve, önálló köteteket képeznek. A folyóiratról évenként egy kötet jelenik meg hat füzetben, füzetenként átlag 6 iv terjedelemben.

A kéziratok a következő címre küldendők:

Jánossy Lajos akadémikus  
1121 Budapest XII., Konkoly Thege út  
Központi Fizikai Kutató Intézet

Ugyanerre a címre küldendő minden szerkesztőségi levelezés.

A közlésre el nem fogadott kéziratokat a szerkesztőség lehetőleg visszajuttatja a szerzőkhöz, de felelősséget a beküldött, el nem fogadott kéziratok megőrzéséért vagy továbbításáért nem vállal.

A folyóirat előfizetési ára kötetenként 48 Ft. Belföldi megrendelések az Akadémiai Kiadó, 1363 Budapest V., Alkotmány utca 21. (pénzforgalmi jelzőszámunk 215-11 488), külföldi megrendelések a „Kultúra” Könyv- és Hírlap Külkereskedelmi Vállalat, 1389 Budapest I., Fő utca 32. (pénzforgalmi jelzőszám: 218-10 990) útján eszközölhetők.

A kéziratokkal kapcsolatban a szerkesztőség a következőket kéri a szerzőktől:

1. A dolgozat elé rövid tartalmú ismertetőt írjanak.
2. A levezetéseknek csak a gondolatmenetét és főbb lépéseit közöljék. Ha részletezésre lesz szükség, a szerkesztőség azt külön fogja kérni.
3. A kéziratokat gépelve, egy oldalra írva, 4 cm-es margóval, kettős sorközzel készítsék el.
4. Az ábrákat ceruzával, sima fehér papírra rajzolják. A nyomda számára a rajzok elkészítését a Kiadó vállalja.
5. Az ábrák alá rövid magyarázószöveget írjanak.
6. A kéziratban az érvényben levő kiadói előírások szerint adjanak szedési útmutatásokat.
7. A szövegben az irodalmi utalásokat szögletes zárójelbe tegyék. Az irodalmi adatok megadásakor a folyóiratban kialakult formát használják.



# POZITRON ANNIHILÁCIÓ IONKRISTÁLYOKBAN\*

BALOGH GY. ÁDÁM

MTA Központi Fizikai Kutató Intézet, Budapest

## TARTALOMJEGYZÉK

1. Bevezetés .....	286
2. Elméleti áttekintés .....	287
2.1 Párkeltés .....	287
2.2 Dirac-féle elektron-elmélet .....	289
2.3 Elektron—pozitron konjugáció .....	289
2.4 Feynman gráfok .....	290
2.5 Annihiláció .....	293
2.5.1 Kétfotonos annihiláció .....	293
2.5.2 Egyfotonos annihiláció .....	294
2.5.3 A pozitronium annihilációja .....	295
2.5.4 Ortopozitronium 3 fotonos annihilációja .....	296
3. Alkalmazási lehetőségek .....	296
3.1 Molekuláris anyagok .....	299
3.2 Folyadékok .....	301
3.3 Szilárd anyagok .....	302
4. Ionkristályok .....	305
5. Fémek .....	306
5.1 A szabad elektron közelítés .....	306
5.2 Elektromágneses elméletek .....	307
6. Kísérleti módszerek .....	308
6.1 Az élettartammérés .....	308
6.2 A szögkorrelációs módszer .....	310
7. Az élettartamspektrum paraméterei és az élettartammérések interpretációja .....	314
8. Irodalmi áttekintés .....	316
8.1 Kötött pozitronállapotok ionos anyagokban .....	316
8.2 Pozitroncsapdák alkáli halidokban .....	318
8.2.1 Kölcsönhatás F-centrumokkal .....	318
8.2.2 A-centrumok kialakulása .....	321
9. Mérési eredmények .....	323
9.1 Mérési eredmények részletes ismertetése .....	323
9.1.1 A mérés közben elszennvedett sugársérülés vizsgálata .....	323
9.1.2 Pozitron-F-centrum kötött állapotok kialakulásának vizsgálata .....	324
9.1.3 A-centrumok kialakulásának vizsgálata .....	328
9.1.4 Precipitátumok és pozitronok kölcsönhatásának vizsgálata .....	330
9.1.5 Szögkorrelációs mérőberendezés építése .....	331
9.2 Mérési eredmények összefoglalása .....	335

\* Egyetemi doktori disszertáció.  
Megvédve 1975. május 14.



10. Köszönetnyilvánítás .....	337
11. Irodalomjegyzék .....	337
12. Szerzők betűrendes listája .....	338

## 1. Bevezetés

A pozitron és a pozitronium annihilációja már több évtizede ismert, mégis e jelenségek gyakorlati alkalmazása még napjainkban sem terjedt el széleskörűen. A pozitron azaz a pozitív töltésű, de egyéb fizikai paramétereiben az elektronnal teljesen megegyező elemi rész létezését Dirac már 1930-ban megjósolta. Az általa levezetett relativisztikus állapotegyenlet szimmetriájából a pozitron léte éppúgy következett, mint az elektroné. Néhány évvel később 1933-ban *Anderson* már kísérletileg is kimutatta a pozitron létezését. *Wilson* kamrában olyan részek nyomaira bukkant, amelyek pályája a mágneses tér hatására az elektronhoz képest ellenkező irányban görbült. A pozitron így végérvényesen helyet kapott az elemi részek egyre bővülő táblázatában. Nem sokkal később 1934-ben már megjósolták egy H atom szerű kötött pozitronelektron rendszer létezését, amelyet pozitroniumnak neveztek el, kísérletileg azonban csak 1951-ben sikerült *Deutsch*-nak kimutatnia.

A pozitron csak önmagában stabil részecske. Elektronnal találkozáskor azonban az Einstein-féle tömeg-energia ekvivalencia elvnek megfelelően annihilálódik azaz gamma kvantumokká sugárzódik szét. Ezt a folyamatot nevezik pozitron annihilációnak. Ha a pozitron valamely anyagon halad át az azonnali, szabad annihiláción kívül pozitronium is képződhet, amely rövid ideig stabil rendszer ( $\sim ns$ ) és csak ezen idő elteltével sugárzódik szét. Ez a pozitronium annihiláció.

A témakört két alapvető részre oszthatjuk. Az első magukkal az annihilációs jelenségekkel foglalkozik, ezek fizikáját igyekszik tisztázni. A második már felhasználja a pozitron annihilációt különféle anyagok kutatására. Az alkalmazások igen széleskörűek lehetnek. Jelenleg kristályfizikai, fémfizikai, kémiai és biológiai kísérletek folynak pozitron annihiláció segítségével. A pozitron annihiláció tehát egy alkalmazott magfizikai módszer, amely számos határterületen segítheti a kutatókat és mint ilyen leginkább a Mössbauer mérésekhez hasonlítható.

A pillanatnyilag rendelkezésre álló eredmények még nem adnak végleges képet sem magukról az annihilációs jelenségekről, sem a vizsgált anyagok tulajdonságairól. Ahhoz, hogy előbbre léphessünk előbb néhány alapvető kérdést kell megválaszolni. Ilyen például az, hogy a pozitronok mely hibahelyekkel hoznak létre kötött állapotokat a kristályokban, és milyen ezen kölcsönhatások jellege. Ezért fontos például a pozitron-A centrum, ill. a pozitron-F centrum kötött állapotok vizsgálata. Mivel az Á centrum nem más mint egy kationvakancia, kationvakanciák pedig kétvegyértékű szennyezők bevitelével kelthetők a kristályban, igen fontos volt megvizsgálnunk van-e korreláció és milyen a pozitronok élettartama és a bevitt szennyezések koncentrációja között. Eredményül kaptuk, hogy:

- a) valóban létezik ilyen korreláció
- b) sikerült analitikusan is megadni ezen korreláció függvényalakját.

Hasonlóképp tisztáztuk az F centrumok kérdését. Röntgenbesugárzással és additív színezéssel magas F centrum koncentrációt hoztunk létre a kristályokban, és megvizsgáltuk, hogy a pozitron annihilációs élettartam mérések kimenő paraméterei



változnak-e az  $F$  centrum koncentráció függvényében. Eredményül nem tudtunk ilyen korrelációt kimutatni, ami azt jelenti, hogy a pozitronok az  $F$  centrumokkal csak igen gyengén hatnak kölcsön.

Ezenkívül megvizsgáltuk az erősen szennyezett kristályokban jelenlevő precipitátumok és pozitronok kölcsönhatását, és azt találtuk, hogy ilyen kölcsönhatás egyáltalán nem létezik, vagy igen gyenge, méréseinket tehát nem zavarja.

Meghatároztuk termolumineszcens dozimetria segítségével a vizsgált kristályminta által a pozitronforrástól elszenvedett dózist, és megállapítottuk, hogy ez a kristályokban elhanyagolható sugársérülést okoz.

Végül pedig befejeztük egy szögkorrelációs mérőberendezés építését, elvégeztük geometriai beállítását, és felvettük vele az első görbéket.

A dolgozat első részében (2. pont) áttekintjük a pozitron annihilációval kapcsolatos elméleti kérdéseket, a célból, hogy megkapjuk azokat az egyszerű összefüggéseket, amelyeket a későbbiekben az irodalmi áttekintés során szeretnénk felhasználni.

A következő részben (3., 4., 5. pont) áttekintést adunk a pozitron annihiláció alkalmazási lehetőségeiről, molekuláris anyagok, ionkristályok, fémek esetében.

A harmadik rész (6. pont) a kísérleti módszereket foglalja össze.

A negyedik (7. pont) az élettartam-spektrumok kiértékelése során használt jelöléseket és ezen spektrumok legáltalánosabb interpretációját közli.

A következő rész (8. pont) részletes irodalmi áttekintést ad az általunk is vizsgált területről, az ionkristályokról.

Az utolsó rész (9. pont) a mérési eredményeket foglalja magába.

## 2. Elméleti áttekintés

### 2.1 Párkeltés

Mivel az annihiláció a párkeltés inverz folyamata, először röviden a párkeltésről beszélünk.

Ha a beeső elektromágneses sugárzás energiája eléri a  $2m_e c^2 = 1,02$  MeV értéket pozitron—elektron párkeltés energetikailag lehetséges. Ahhoz azonban, hogy a párkeltés valóban létrejöjjön az szükséges, hogy a közelben legyen egy másik atommag vagy elektron, amelyik a felesleges impulzusmennyiséget fel tudja venni. Ugyanis a párkeltésnél a  $2m_e c^2$  feletti energia a keletkező részecskék kinetikus energiája lesz. A keletkező pozitron és elektron mozgását relativisztikusan kezelve a pár teljes energiája:

$$(E_{\text{pár}})_{\text{teljes}} = E_{\text{kin}} + 2m_e c^2 = 2mc^2.$$

Vezessük be a következő jelöléseket:

$$\beta = \frac{v}{c} \quad \text{az elektron redukált sebessége,}$$

$$\gamma = (1 - \beta^2)^{-\frac{1}{2}}, \quad \text{így:}$$

$$(E_{\text{pár}})_{\text{teljes}} = 2\gamma m_e c^2.$$



A relativisztikus kinematikának megfelelően a pár teljes impulzusa:

$$p_{\text{pár}} = 2\gamma m_e v = \frac{v}{c^2} (E_{\text{pár}})_{\text{teljes}}.$$

A beeső  $\gamma$  sugárzás energiája és impulzusa:

$$E_\gamma = h\nu, \quad p_\gamma = \frac{h\nu}{c} = \frac{E_\gamma}{c}.$$

Az energiamegmaradás megköveteli, hogy:

$$(E_{\text{pár}})_{\text{teljes}} = E_\gamma \text{ teljesüljön, tehát:}$$

$$p_\gamma c = \frac{c^2}{v} p_{\text{pár}}, \text{ ebből következik, hogy:}$$

$$p_{\text{pár}} = \frac{v}{c} p_\gamma < p_\gamma,$$

ami azt mutatja, hogy a pár teljes impulzusa kisebb a beeső  $\gamma$  sugárzás teljes impulzusánál. A különbséget kell éppen felvennie a közelben tartózkodó partnernek, amely lehet egy mag vagy egy atomi elektron. Ha magról van szó, melynek tömege viszonylag nagy, a visszalökési energia elhanyagolhatóan kicsi. Ha azonban elektron veszi fel az energia különbséget a visszalökési energia is számottevővé válik. Általánosan a párkeltés küszöbenergiájára írhatjuk, hogy:

$$E_{\text{küszöb}} = 2m_e c^2 (1 + m_e/M),$$

ahol  $M$  a visszalökött rész tömege [1]. Mag esetében  $M$  sokkal nagyobb mint  $m_e$  ezért  $E_{\text{küszöb}} = 2m_e c^2 = 1,02 \text{ MeV}$ . Ha azonban elektronról van szó, akkor az energiaátadás már számottevő és a küszöbenergia:

$$E_{\text{küszöb}} = 4m_e c^2 = 2,04 \text{ MeV}.$$

A két folyamat nemcsak kinematikában és küszöbenergiában különbözik, hanem ködkamrában vagy buborékkamrában is más karakterisztikus nyomok figyelhetők meg. Ha mag terében történik a párkeltés, akkor két nyomot látunk a keletkező elektronnak és pozitronnak megfelelően, ha azonban elektron terében játszódik le a folyamat, akkor megjelenik egy harmadik nyom is, a nagy energiával visszalökött elektroné.

A párkeltés valószínűsége alacsony beeső  $\gamma$  energiákon kicsi, később azonban megnő és domináns folyamattá válik. Korai kutatások, melyek a  $\gamma$  sugárzás nehéz elemeken való szóródását és abszorpcióját vizsgálták azt mutatták, hogy csak Compton effektus és fotoelektromos hatás játszódik le, de 1932/33-ban Anderson megfigyelte elektron-pozitron pár keletkezését ólomfóliában kozmikus sugárzás hatására. Ez megfelelt Oppenheimer interpretációjának a párkeltésről a Dirac-féle elektron elmélet alapján.

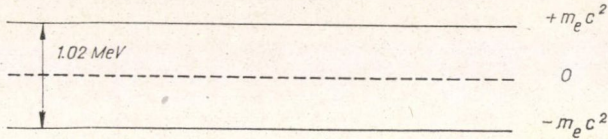


## 2.2 Dirac-féle elektronelmélet

A relativisztikus kvantummechanikából ismert Dirac-egyenletből következik, hogy egy szabad elektronnak negatív és pozitív energiájú állapotai egyaránt létezhetnek. Az energia:

$$E = \pm(p^2 c^2 + m_e^2 c^4)^{\frac{1}{2}}. \quad (2)$$

Ezek az energiaértékek  $-\infty$ -tól  $-m_e c^2$ -ig, majd  $+m_e c^2$ -től  $+\infty$ -ig terjedhetnek.  $-m_e c^2$  és  $+m_e c^2$  között tehát egy  $2 m_e c^2$  széles szakadék van, amint azt a következő ábra mutatja:



Klasszikusan szemlélve az elektron nem tud áthaladni a tiltott sávon, a kvantummechanika azonban véges valószínűséget ad erre az átmenetre. Dirac feltételezte, hogy minden negatív energiájú állapot be van töltve, és ezek a negatív energiájú elektronok egyenletes sűrűséggel helyezkednek el. Így semmilyen kitüntetett irány sem létezik köztük, tehát hatásukra elektromos vagy mágneses tér egyáltalán nem alakulhat ki. A pozitív energiájú állapotok sohasem mehetnek át negatív energiájúba, hiszen ezt az átmenetet a Pauli-elv tiltja. Ez magyarázza azt, hogy az elektronok sohasem mennek át fotonkibocsátással a számukra kedvezőbb energiájú állapotokba. A negatív energiájú állapotokat csak akkor vesszük észre, ha egyikük elegendő energiájú foton ( $1,02 \text{ MeV}$ ) abszorbeálva pozitív állapotba megy át. Ilyenkor egy közönséges elektron jelenik meg, és a negatív állapotú Dirac-tengerben egy lyuk marad vissza. A negatív töltés, — energia — és tömeg hiányát észrevesszük, mégpedig a normális állapothoz viszonyítva pozitív töltés, energia és tömeg formájában. Az így keletkezett lyuk önálló fizikai objektumként létezik mindaddig, amíg egy pozitív energiájú elektron bele nem esik. Ekkor a lyuk is és a közönséges elektron is eltűnik, és csak a fotonok formájában kisugárzott energia figyelhető meg. Ezt a lyukat nevezzük pozitronnak. A Dirac-egyenlet tehát végtelen sok negatív energiájú elektron létezését követeli meg, valamint elektron—pozitron párok keltését és eltűnését. Ezek a jelenségek jól megfigyelhetők radioaktív atomok  $\beta^+$  bomlása és  $K$  befogás esetén.

## 2.3 Elektron-pozitron konjugáció

Míg Dirac úgy képzelte el a pozitront, mint egy lyukat az elektronok negatív energiájú tengerében, addig Feynman teljesen más közelítést alkalmazott. Az ő elképzelése szerint a pozitron nem más, mint olyan részecske, amely pontosan úgy viselkedik, mint az elektron, egy idő-tükrözött világban.

Ennek szemléltetésére képzeljük el, hogy permanens mágnes pólusai közti homogén  $B$  térben egy elektron halad (1a ábra).

Mivel mágneses térben mozgó töltésre a Lorentz erő hat:  $F = q(v \times B)$ , ahol a  $q$  a töltés,  $v$  a mozgó részecske sebessége és  $B$  a mágneses indukcióvektor.



Az elektron mozgását a következőképpen írhatjuk le:

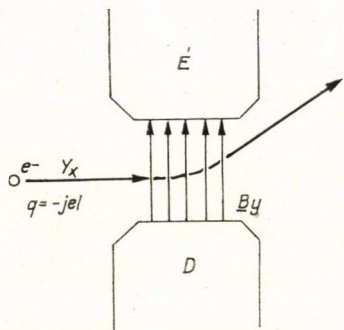
$$m_e \frac{d^2 z}{dt^2} = q v_x B_y = -|e| \frac{dx}{dt} B_y$$

Az időtükrözött helyzetet a következő 1b ábra mutatja. Ebben az esetben a fenti mozgásegyenlet a  $t \rightarrow -t$  idő-tükrözéssel szemben invariáns marad, ha a töltés előjelét is megváltoztatjuk  $q \rightarrow -q$ , ami éppen annak felel meg, hogy egy pozitron halad az ellenkező irányba. Az idő-tükrözés nemcsak  $v_x$  előjelét változtatja meg, hanem  $B_y$ -ét is. Hiszen ha a teret elektromágnessel állítanánk elő, akkor az idő-invertált világban az áram is fordítva folya, és így az indukcióvektor előjelet vált. A két esetet a 2. ábrán láthatjuk. A fentiekből kitűnik, hogy az időtükrözés valóban töltés-konjugációnak felel meg.

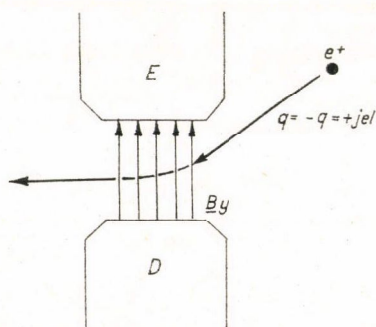
## 2.4 Feynman gráfok

A Feynman javasolta grafikus módszer nemcsak a kölcsönhatási folyamatok fizikai arculatát rajzolja ki, de alkalmas a kölcsönhatási valószínűség pontos matematikai alakjának megformulázására is.

a)

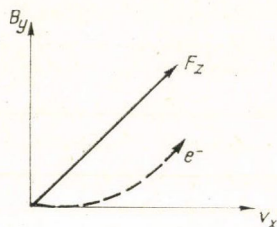


b)

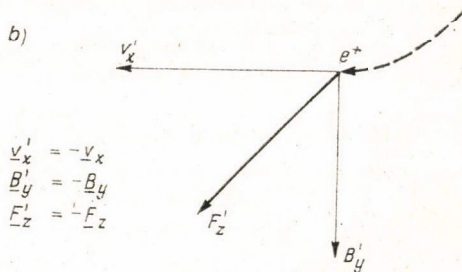


1. ábra. a) elektron pályája homogén mágneses térben b) pozitron pályája homogén mágneses térben, időtükrözött esetben

a)



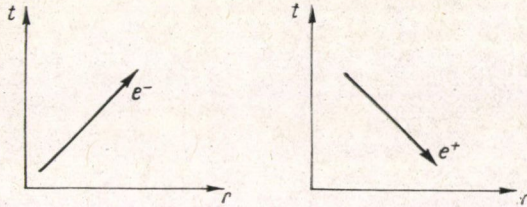
b)



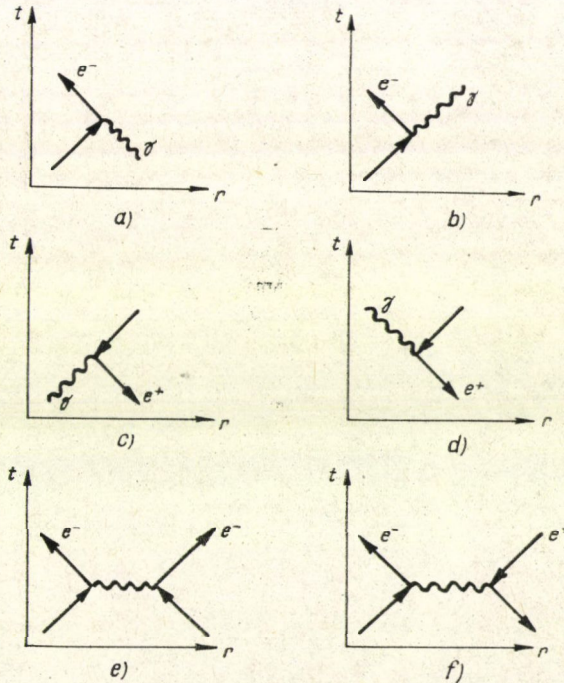
2. ábra. Elektron-pozitron konjugáció a) normál eset, b) idő-, és töltéstükrözött eset



A Feynman gráfokat téridő diagrammon és impulzus térben egyaránt fel lehet rajzolni. Mi most megelégszünk azzal, hogy az alapvető folyamatokat leíró Feynman gráfokat tér-idő reprezentációban szemléltetjük. Az általános tér ( $r$ ) és idő ( $t$ ) koordinátákat használva, a fentieket figyelembe véve, egy elektron, ill. egy pozitron világvonala a következőképpen rajzolható:



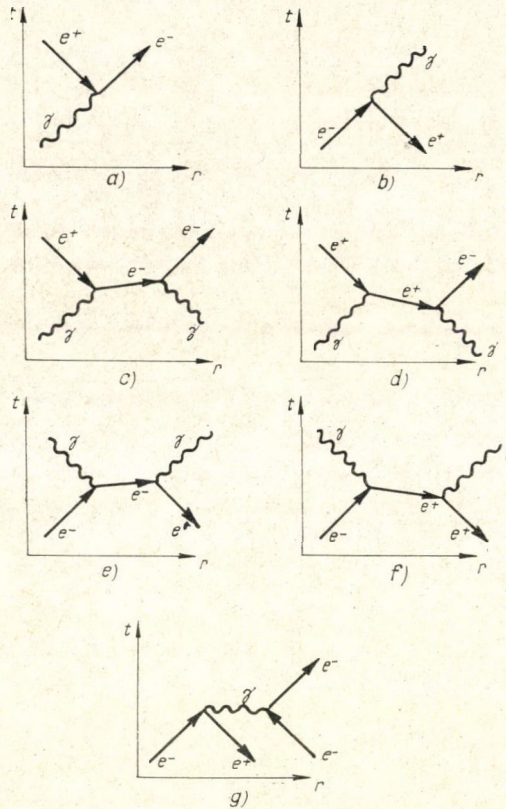
A részecske mozgásában bekövetkező bármilyen változást, például rugalmatlan szórást, a világvonal töreése fogja szemléltetni. Néhány egyszerű Feynman diagrammot mutat a 3. és 4. ábra [3].



3. ábra. Feynman gráfok

- a) elektron szóródása  $\gamma$  kvantum abszorpciója következtében  
 b)  $\gamma$  kvantum emissziója elektron szóródása következtében,  
 c) az a, folyamat pozitronra, d) a b, folyamat pozitronra,  
 e) elektron—elektron szórás virtuális fotoncserével, f) elekt-  
 ron—pozitron szórás virtuális fotoncserével

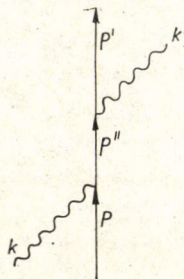




4. ábra. Feynman gráfok

- a) egy kvantum párkeltés, b) egy kvantumos páranihiláció  
 c) két kvantumos párkeltés, a közbülső állapot virtuális elektron, d) két kvantumos párkeltés, a közbülső állapot virtuális pozitron, e) két kvantumos páranihiláció, a közbülső állapot virtuális elektron, f) az előző folyamat virtuális pozitronnal, g) páranihiláció elektron Coulumb terében

A Feynman gráfok impulzus térben való reprezentációjára részletesebb tárgyalást mellőzve, vizsgáljunk meg csupán egyetlen példát a Compton szórást. A foton impulzusa  $hk \rightarrow hk'$ -re az elektroné pedig  $p \rightarrow p'$ -re változik.





## 2.5 Annihiláció

A Dirac elmélet alapján az annihiláció úgy értelmezhető, hogy egy pozitív energiájú elektron betölt egy negatív energiájú vakanciát egy mag vagy egy elektron közelében, és eközben energiát sugároz ki elektromágneses sugárzás formájában. A részecske-antirészecske pár ezen Coulomb térben végbemenő annihilációja úgyis felfogható, mint a fékezési sugárzás speciális esete, hiszen fékezési sugárzás minden olyan esetben keletkezik, amikor töltött részecske sebessége megváltozik. A pozitív állapotú elektronok pedig egy lyuk (pozitron) közelébe érve a Coulomb hatás miatt megváltoztatják sebességüket, végül rekombinálnak a lyukkal, és fékezési sugárzásnak tekinthető elektromágneses sugárzást bocsátanak ki.

### 2.5.1 Kétfotonos annihiláció

A szabad elektron-pozitron pár egy fotonra való szétsugárzását az energia-, és impulzusmegmaradás tiltja. Gondoljuk el, hogy a szabad elektron-pozitron pár eredő impulzusa tömegközépponti rendszerben 0, míg energiája nem. Ebből következik, hogy az emittált fotonnak is  $k=0$ ,  $\varepsilon \neq 0$ -t kellene teljesíteni, ami azonban lehetetlen. Szabad pár szétsugárzásához tehát legalább két foton kell emittálni. Ha a pozitron kötött, atomi elektronnal ütközik, akkor természetesen az egyfotonos annihiláció is lehetséges.

Ha a kétfotonos annihiláció Feynman gráfjából felírjuk a kölcsönhatás mátrix-elemét, és ezzel kifejezzük a kölcsönhatás teljes hatáskeresztmetszetét, akkor abban az esetben ha a pozitron nyugvó elektronnal ütközik a következő kifejezést kapjuk [4]:

$$\sigma = \frac{\pi r_0^2}{\gamma + 1} \cdot \left( \frac{\gamma^2 + 4\gamma + 1}{\gamma^2 - 1} \cdot \ln(\gamma + \sqrt{\gamma^2 - 1}) - \frac{\gamma + 3}{\sqrt{\gamma^2 - 1}} \right)$$

ahol:  $\gamma = \frac{\varepsilon_+^0}{m}$ ,  $\varepsilon_+^0$  a pozitron energiája az elektronhoz rögzített rendszerben.

Ezek után két esetet különböztethetünk meg:

a) Ha a pozitronenergia kicsi:

$$\frac{\varepsilon_+^0}{m} = \gamma \ll 1 \rightarrow \sigma = \frac{\pi r_0^2}{v_+}$$

tehát, a hatáskeresztmetszet a pozitron sebességével fordítottan arányos.

b) Ha a pozitronenergia nagy:  $\frac{\varepsilon_+^0}{m} = \gamma \gg 1 \rightarrow$

$$\sigma = \pi r_0^2 \frac{m}{\varepsilon_+^0} \left( \ln^2 \frac{\varepsilon_+^0}{m} - 1 \right),$$

A szétsugárzás valószínűsége ( $\omega$ ) azonban már nem függ a pozitron sebességétől:

$$\omega = Z \cdot n \cdot v_+ \cdot \sigma = Z \cdot n \cdot \pi \cdot r_0^2 \quad \text{és} \quad \tau = \frac{1}{\omega}, \quad \text{ahol:}$$

$n$  a térfogategységben levő atomok száma [3].



### 2.5.2 Egyfotonos annihiláció

Ha a pozitron kötött elektronnal találkozik bekövetkezhet az egyfotonos annihiláció is. Ezt a folyamatot elsőrendű mátrix-elem határozza meg, amely egycsomópontos Feynman gráfot jelent. Felírva a folyamat teljes hatáskeresztmetszetét a következő képletet kapjuk: [1]

$$\sigma = 4\pi r_0^2 \frac{Z^5}{137^4} \frac{m^3}{p_+ (\varepsilon_+ + m)^2} \left[ \frac{\varepsilon_+^2}{m} + \frac{2}{3} \frac{\varepsilon_+}{m} + \frac{4}{3} = \frac{\varepsilon_+ + 2m}{p_+} \ln \frac{\varepsilon_+ + p_+}{m} \right],$$

Itt megint két esetet különböztethetünk meg:

a)  $v_+ \ll 1$ , nem relativisztikus esetben:

$$\sigma = \frac{4\pi}{3} r_0^2 \frac{Z^5}{137^4} \frac{p_+}{m} \sim v_+$$

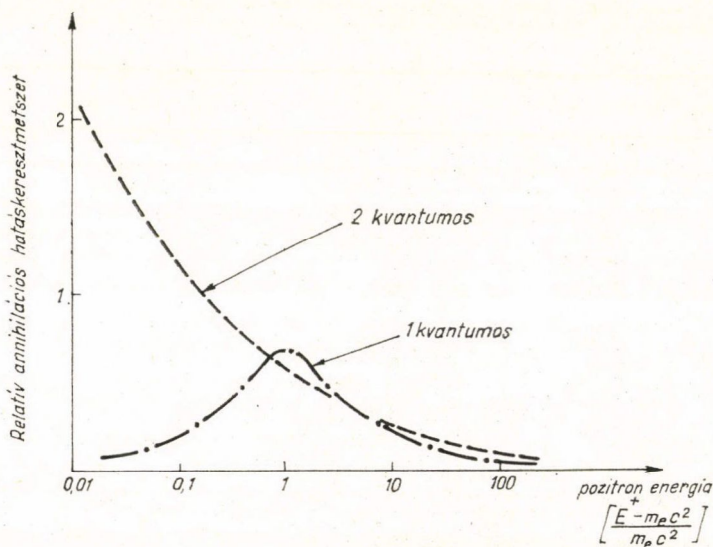
b)  $\varepsilon_+ \gg 1$ , extrém relativisztikus esetben:

$$\sigma = 4\pi r_0^2 \frac{Z^5}{137^4} \cdot \frac{m}{\varepsilon_+},$$

Látható, hogy kis energián szemben a kétfotonos annihilációval a szétsugárzás hatáskeresztmetszete a pozitron sebességével arányos. Ebből következik, hogy kis energiájú pozitronnál az egyfotonos szétsugárzás valószínűsége sokkal kisebb:

$$\max. \left[ \frac{\sigma(1)}{\sigma(2)} \right]_{\varepsilon_+ \approx 10 \text{ m}}^{\text{Pb}} \approx 0,2,$$

Az egy és kétfotonos annihiláció arányát mutatja az 5. ábra. A számításokat 50 MeV pozitron energiáig végezték, miközben stacionárius elektronokat tételeztek fel [3].



5. ábra. Az egy-, és kétfotonos annihiláció aránya



### 2.5.3 A pozitronium annihilációja

A kétfotonos annihilációra kapott eredmények felhasználhatók a pozitronium bomlására is. Megkülönböztetünk orto (3S) és para (1S) pozitroniumot, aszerint, hogy a pozitroniumot alkotó elektron és pozitron spinje párhuzamos, vagy ellentett állású. Mivel a 3S állapot eredő spinje 1, és két fotonból álló rendszer nem rendelkezhet egységnyi impulzusmomentummal, ezért az orto pozitronium nem bomolhat két fotonra, sőt mivel a 3S állapot páratlan töltéspotozítású, nem bomolhat páros számú fotonra sem. Ugyannakkor a parapozitronium mint páros töltéspáritású rendszer csak páros számú fotonra bomolhat. Ezért a pozitronium élettartamát meghatározó folyamat ortopozitroniumnál a 3, parapozitroniumnál a kétfotonos annihiláció.

Megmutatjuk, hogy a pozitronium bomlási valószínűsége nem különbözik lényegesen a szabad elektron—pozitron párétól. Nézzük a pozitronium S állapotának hullámfüggvényét [3]:

$$\psi(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi \cdot a^3}} e^{-\frac{r}{a}},$$

ahol:  $a = a$  pozitronium sugara, amely a megfelelő Bohr-sugár kétszerese, mivel a pozitronium redukált tömege kétszerese az elektronénak:

$$a = 2a_0 = \frac{2\hbar^2}{m_e^2},$$

Annak a valószínűségét, hogy a pozitroniumban az elektron impulzusa éppen  $\mathbf{p}$  a pozitroné pedig  $-\mathbf{p}$  legyen, a  $\psi(r)$  hullámfüggvény Fourier komponense határozza meg:

$$\psi(\mathbf{p}) = \int \psi(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{p}\mathbf{r}} d\mathbf{r} = \frac{8\sqrt{\pi \cdot a^3}}{(1 + a^2 \cdot p^2)^2}$$

tehát, ha  $p$  nagy érték, akkor  $\psi(p)$  kicsi. Ebből látjuk, hogy a  $\psi(r)$  hullámfüggvényben csak alacsony impulzusok szerepelnek. Ezért a pozitronium bomlását úgy tekinthetjük, mint 0 impulzusú, de meghatározott spinállású szabad pozitron-elektron pár bomlását.

Mivel az egy és 0 spinű állapotok relatív súlya  $3/4$ , ill.  $1/4$  írhatjuk, hogy:

$$\bar{\omega} = 3/4\omega_1 + 1/4\omega_0,$$

ahol:  $\omega_1$  az ortopozitronium bomlási valószínűsége

$\omega_0$  a parapozitronium bomlási valószínűsége

$\bar{\omega}$  a szabad pár bomlási valószínűsége a spin irányokra átlagolva.

Másrészt írhatjuk, hogy:

$$\bar{\omega} = \bar{\omega}_{2\gamma} + \bar{\omega}_{3\gamma} + \dots$$

De:

$$1/4\omega_0 = \bar{\omega}_{2\gamma} + \bar{\omega}_{4\gamma} + \dots$$

$$3/4\omega_1 = \bar{\omega}_{3\gamma} + \bar{\omega}_{5\gamma} + \dots$$



Ebből következik, hogy:

$$\omega_0 = 4\bar{\omega}_{2\gamma}$$

$$\omega_1 = 4/3\bar{\omega}_{3\gamma}.$$

Ha azonban  $v_+$  kicsi:

$$\sigma_{2\gamma} = \frac{\pi r_0^2}{v_+} \quad \text{és} \quad \omega_{2\gamma} = Z \cdot n \cdot v_+ \sigma = Z \cdot n \cdot \pi \cdot r_0^2.$$

$$\text{Mivel: } Z=1 \text{ és } n \rightarrow (\psi(0))^2 = \frac{1}{\pi \cdot a^3}.$$

Írhatjuk, hogy:

$$\omega_0 = 4\bar{\omega}_{2\gamma} = 4 \frac{\pi r_0^2}{\pi \cdot a^3} = 4 \frac{r_0^2}{a^3} = 0,8 \cdot 10^{10} \text{ s}^{-1},$$

és:

$$\tau = \frac{1}{\omega} = 0,125 \cdot 10^{-9} \text{ s} = 0,125 \text{ nsec},$$

#### 2.5.4 Ortopozitrónium 3 fotonos szétsugárzása

A harmadrendű Feynman gráfból felírva a megfelelő mátrixelemet, és ebből kiszámolva a hatáskeresztmetszetet, azt kapjuk, hogy [3]:

$$\bar{\omega}_{3\gamma} = \frac{1}{6\pi} (\pi^2 - 9) \alpha \cdot \frac{r_0^2}{a_0^3}, \quad \text{ahol: } \alpha = \left[ \frac{r_0^2 m^2 e^6}{\hbar^6} \right]^{1/5}.$$

Mivel:  $\omega = 4/3 \bar{\omega}_{3\gamma}$ , ezért:

$$\omega_1 = \frac{2}{9\pi} (\pi^2 - 9) \cdot \alpha \cdot \frac{r_0^2}{a_0^3} = 7,1 \cdot 10^6 \text{ s}^{-1}, \quad \text{így:}$$

$$\tau = \frac{1}{\omega_1} = 0,140 \cdot 10^{-6} \text{ s} = 140 \text{ nsec}.$$

Ebből láthatjuk, hogy az ortopozitrónium élettartama körülbelül ezerszerese a para-pozitróniuménak, a hatáskeresztmetszetek aránya pedig:

$$\frac{\sigma_{3\gamma}}{\sigma_{2\gamma}} = \frac{3/4\omega_1}{1/4\omega_0} = 3 \frac{\tau_0}{\tau_1} = 1/372.$$

Tehát a  $2\gamma$  annihiláció 372-szer valószínűbb a  $3\gamma$ -nál.

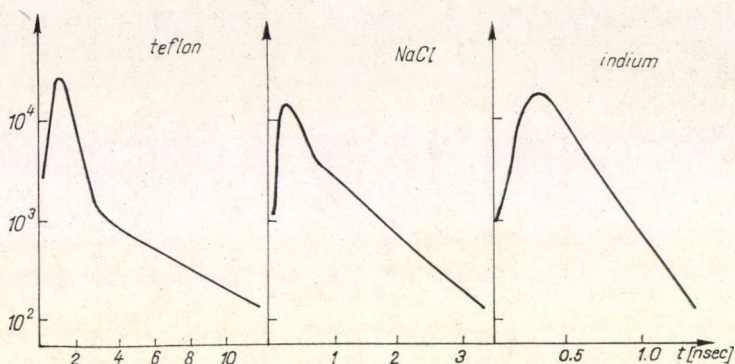
### 3. Alkalmazási lehetőségek

A pozitronannihilációs kutatások alkalmazási köre egyre szélesebbé válik. Ismeretesek fizikai, kémiai és biológiai alkalmazások, azonban ez a szaktárgyi felosztás már nem sokat mond, ezért inkább egy másikat fogunk használni, amely a vizsgálandó anyagok szerint szelektál. Így beszélni fogunk:



- a) molekuláris anyagokról
- b) ionkristályokról
- c) fémekről.

Hogy bebizonyítsuk ezen felosztás jogosságát, mindenekelőtt bemutatunk három jellegzetes spektrumot, amelyek az egyes anyagokon felvett pozitron élettartam méréseket szemléltetik.



A molekuláris anyagok általában két, vagy három komponensre értékelhetők ki, és az egyes élettartam-komponensek 0,1—10 nsec-os tartományba esnek. Az ionkristályok szintén több komponenssel rendelkeznek, melyek sokszor olyan hasonlóak, hogy kiértékelésük komoly számítógépes problémát okoz. A fémeknél az élettartam általában jól kielemezhető egyetlen komponenssel, melynek értéke minden esetben rövidebb 1 nsec-nál. A fenti mintaspektrumok időskálája igen lényeges, és jól látszik, hogy a fémek méréséhez mennyivel jobb felbontású berendezés szükséges, mint az ionkristályok, vagy méginkább a molekuláris anyagok esetében. Az *a*, és *b*, típusú anyagok több komponensű spektruma azt mutatja, hogy a pozitronok többféle kötött állapotból tudnak szétsugározni.

Az elterjedten használt pozitron források ( $^{22}\text{Na}$ ,  $^{64}\text{Cu}$ ,  $^{58}\text{Co}$ ) által emittált pozitronok energiája körülbelül 0,5 MeV. Az ilyen energiájú pozitronok gyorsan lelassulnak belépve a kondenzált anyagba, azáltal, hogy ütköznek a rendszer elektronjaival. Amíg a pozitron energiája lényegesen nagyobb annál, hogy elektronokat gerjesszen, minden ütközésnél durván energiájának felét elveszíti. Ha feltesszük, hogy az ütközésmentes szakaszok hossza összemérhető a rácsállanóval, akkor arra az eredményre jutunk, hogy a pozitronok energiája  $10^{-15}$  sec alatt lecsökken néhány elektronvoltage. A további lassulás, melynek során a pozitron néhány elektronvoltage energiáját is elveszíti, és végül csak termikus energiával rendelkezik (0,025 eV), már különböző anyagokra eltérő folyamat. Lee és Whiting (1955) kiszámították, hogy fémekben a teljes termalizáció ideje 3 psec ( $3 \cdot 10^{-12}$  sec) [5]. Ezért jogosan feltételezhetjük, hogy fémekben a legtöbb pozitron az annihiláció előtt már termalizált állapotban volt. Sajnos szigetelőkben a folyamat nem ilyen egyszerű. Ott a pozitronok a tiltott sáv miatt nem adhatnak át akármekkora energiát, ezért a termalizáció végső fázisában (néhány elektronvoltage  $\rightarrow$  0,025 eV) csak a



rácsrezgések gerjesztésével csökkenthetik energiájukat. *De Benedetti et al.* (1950) kiszámították, hogy ilyen esetben a termalizáció ideje kb. 300 psec (0,3 nsec) [6]. Ha ezt, most összevetjük az imént tárgyalt mintaspektrummal, láthatjuk, hogy ez a 0,3 nsec már jócskán belelóg a rövidebb élettartam-komponensekbe, azaz a pozitron termalizációja nem fejeződik be tökéletesen az annihiláció előtt. A termalizáció végső fázisát tovább bonyolítja és lassítja a pozitroniumatomok kialakulása, melyek gyengébben hatnak kölcsön környezetükkel, mint a szabad pozitronok.

Mint *Wallace* (1960) megmutatta [7], pozitronium csak olyan molekuláris anyagokban képződhet, ahol az elektronok csak az egyes molekulákon belül cserélődhetnek, és a molekulák közti kovalens erők taszító jellegűek. A pozitroniumképződést tanulságos és egyszerű energetikai megfontolásokból levezetni. Ezt először *Ore* (1949) [8] végezte el gázokra, azóta a gondolatmenetet általánosították.

A pozitronium atom kötési energiája 6,8 eV (a H atom kötési energiájának éppen a fele, mivel az effektív tömege kétszeres) részecskementes térben, de anyagban kisebb is lehet. Ha a vizsgálandó anyag molekulájának ionizációs potenciálja  $V_i$ , akkor a pozitronium képződés feltétele, hogy:  $E_{e+} > V_i - 6,8$  eV, hiszen a pozitronnak ki kell szabadítani egy elektront az atomi kötelékből, de a kötés létrejötte szolgáltat még 6,8 eV energiát. Ha a pozitron energiája az ionizációs potenciálnál is nagyobb, akkor a pozitronium képzésnél sokkal nagyobb valószínűséggel megy végbe rugalmatlan szórás. Az gondolhatjuk tehát, hogy az energia feltétel:

$$V_i > E_{e+} > V_i - 6,8 \text{ eV} \quad \text{alakú.}$$

Ezt azonban még pontosítani kell a gerjesztési szintek figyelembevételével. Ugyanis ha a molekula legalsó gerjesztési szintje  $V_g$ , és a pozitron energiája nagyobb ennél a gerjesztési szintnél, akkor a pozitron inkább gerjeszt. Így végül azt kapjuk, hogy a pozitronium képzés a következő energiatartományban a legvalószínűbb:

$$V_g > E_{e+} > V_i - 6,8 \text{ eV.}$$

Ezt a tartományt nevezzük Ore-résnek, melynek szélessége a pozitronium hozam fontos jellemzője. Természetesen még ezen energiatartományon belül is végbemehetnek olyan egyéb folyamatok, például a rács rezgési módusainak gerjesztése, vagy pozitron-molekulakomplexek 1967 [9]. Kis koncentrációjú szennyezések bevitelével változtathatjuk az Ore-rés szélességét. A szennyező anyag gerjesztési nívókat hozhat létre az Ore-résen belül, és így a pozitronium hozam csökken, másrészt ilyen szennyezések az ionizációs potenciált is csökkenthetik, ekkor viszont a pozitronium képződés nő (*Brandt és Feibus* 1968) [10].

Tovább bonyolítja a helyzetet, hogy még a pozitronium kialakulása után is történhetnek változások. A létrejött pozitronium 1/4 része lesz szingulett állapotú parapozitronium, amely 123 psec-os igen rövid idővel szétsugárzódik, de a megmaradó 3/4 rész triplett állapotú ortopozitroniumnak sem kell a rá jellemző 140 nsec-ig élni. Különböző folyamatok, melyek a pozitronium atomok és a rendszer molekulái közti ütközés révén hatnak, befolyásolhatják a pozitronium további sorsát.

Minden ilyen folyamatot, amely az ortopozitronium 140 nsec-os életét valamilyen módon rövidíti, quenchelésnek nevezzük. A quenchelés magába foglalja pél-



dául az orto  $\rightarrow$  para konverziót, amely úgy jön létre, hogy az ortopozitronium ütközve egy páratlan elektront tartalmazó molekulával kicseréli elektronját, és így parapozitroniumba megy át, ami gyorsan annihilálódik. (Ferrell 1957) [11]. Beszélhetünk azonban mágneses tér által létrehozott konverzióról is, amikor az alkalmazott mágneses tér fordítja át a pozitroniumot alkotó valamelyik részecske spinjét. A mágneses tér nemcsak külső, hanem belső is lehet paramágneses molekuláknál (Lee és Celitan 1965) [12]. Ide tartozik még a pick-off annihiláció is, amikor az ütközés során a pozitronium egyik alkotó részecskéjét kicseréli egy másikra, amit a környezetéből vesz föl.

### 3.1 Molekuláris anyagok

Az elmondottak után megkísérélhetjük értelmezni a molekuláris anyagok több komponensű élettartamspektrumait. A hosszú komponens létrejötte, melynek relatív intenzitását  $I_3$ -al jelöljük (élettartama  $\tau_3$ ), valószínűleg az ortopozitronium pick-off annihilációjának következménye, melynek során az ortopozitroniumban levő pozitronok elektronokat vesznek fel a környezetből, azaz saját elektronjaikat lecserélik, és így az ortopozitroniumra jellemző élettartamnál rövidebb idő alatt szétszűrődnek.

Vizsgáljuk meg, milyen pozitronok hozzák létre ezt az  $I_3$  komponenst. Ha értelmezésünk helyes, akkor  $I_3$ -ban csak azok a pozitronok vesznek részt, melyek ortopozitroniumot formáltak. Az összes pozitronok egy része szabadon annihilálódik, míg egy másik része pozitroniumot képez. Tudjuk, hogy ez lehet orto- vagy parapozitronium attól függően, hogy az eredő spin egy vagy nulla. Ennek megfelelően a pozitroniumot alkotó pozitronoknak  $3/4$  része lesz orto állapotban, tehát  $I_3 = 3/4 p$ , ahol  $p$  a pozitronoknak az a része, amely részt vesz a pozitronium képzésben. Tehát  $p = 4/3 I_3$ . Természetesen jelen lesz egy rövid élettartamú komponens is ( $I_1$ ) amely a parapozitronium normál bomlásából származik, és mivel  $p - Ps/o - Ps = 1/3$ , ennek relatív intenzitása  $I_1 = \frac{I_3}{3}$  [13]. Az ilyen rövid élettartamú komponensek fel-

bontása persze igen nehéz, hiszen a legjobb berendezések időfelbontása is két-háromszáz psec. Az előbb említett komponenseken kívül még jelen van legalább egy további komponens is, amely a pozitronok szabad annihilációjából származik.

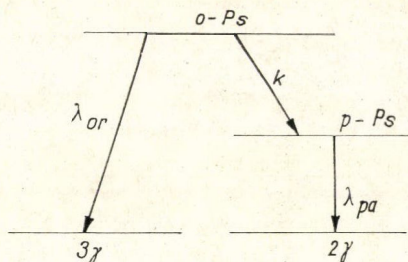
A spektrumok ezen egyszerű interpretációja még nem számol az orto  $\rightarrow$  para konverzió vagy egyéb, még komplexebb kémiai hatások jelenlétével. Ráadásul a spektrum hibás értelmezése túlságosan hosszú spontán annihilációt, vagy pl. túlságosan gyors pick-off annihilációt is eredményezhet. További információkat szerezhetünk az ortopozitronium annihilációjáról a mágneses quenchelésből, vagy a három foton/két foton arány méréseiből. Elegendően nagy mágneses térben az annihiláció módja függ a mágneses kvantumszám értékétől (Wallace 1960 [7], Goldanskij 1967 [9]). Az  $m = \pm 1$  állapotok 3, míg a  $m = 0$  állapotok két fotonra bomlanak. Mivel az ortopozitronium  $m = -1, 0, +1$ , állapotai egyforma súllyal szerepelnek az erős mágneses tér jelenléte a 3 fotonos ortopozitronium annihilációt egy  $1/3$ -os faktorial csökkenti, és ezáltal módot nyújt azonosítására.

A háromfotonos annihiláció arányát kimérhetjük hármass koincidencia technikával (De Blonde 1972) [14], vagy megkaphatjuk az annihilálódó fotonok energiaspektrumából (Gainotti 1964) [15], bár egyik módszer sem túlságosan pontos.



Feltételezve, hogy a fenti interpretáció  $I_3$ -ra helyes volt, vizsgáljuk meg, hogy mennyi a háromfotonos emisszió valószínűsége.

Rajzoljuk fel először az ortopozitronium bomlási sémáját:



A fenti kép megfelel annak a ténynek, hogy az ortopozitronium vagy saját bomlási állandójával  $3\gamma$ -ra annihilálódik, vagy valamilyen konverzióval parapozitroniummá alakul, és lényegesen rövidebb idő alatt  $2\gamma$ -ra sugárzódik szét. Írjuk fel a folyamatokat leíró differenciál egyenleteket:

$$\frac{dN_{or}}{dt} - \lambda_{or} N_{or} - \kappa N_{or} \quad \text{és}$$

$$\frac{dN_{pa}}{dt} = -\lambda_{pa} N_{pa} + \kappa N_{or}$$

Ahhoz, hogy kitűzött kérdésünkre válaszoljunk, elegendő az első egyenlet megoldása, amit azonnal felírhatunk:

$$N_{or} = N_0 \exp(-(\lambda_{or} + \kappa)t).$$

E képletből kapjuk, hogy a három  $\gamma$ /két  $\gamma$  arány egyenlő:

$$3\gamma/2\gamma = \frac{\lambda_{or} N_{or}}{\kappa N_{or}} = \frac{\lambda_{or}}{\kappa} = \frac{\tau_3}{\tau_{or}},$$

Ezek után már könnyen felírhatjuk a három  $\gamma$  emisszió valószínűségét. Ez a valószínűség két részből tevődik össze. Az első részben szerepelnek azok az ortopozitronium atomok, amelyek nem konvertálódnak. Ezekre a valószínűség:

$$I_3 \cdot \frac{\tau_3}{\tau_{or}}.$$

Ezen kívül fellép még a szabad pozitron annihiláció, melyre  $3\gamma/2\gamma=1/372$ . Tehát kapjuk, hogy:

$$P_{3\gamma} = I_3 \tau_3 / t_{orto} + \left(1 - \frac{4}{3} I_3\right) / 372.$$

Az élettartamspektrumok értelmezése nehéz feladat. Az aktuális intenzitás vagy élettartam értékek helyes interpretációjához figyelembe kell venni a rendszer kémiai, elektromos és más szerkezeti tulajdonságait. A probléma komplexitását és bonyolultságát megpróbáljuk néhány példán szemléltetni.

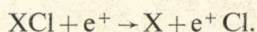


Mint már említettük a három élettartam-komponenst, kondenzált gázok esetén, rendre a parapozitrónium bomlásának, a szabad annihilációnak és az ortopozitrónium pick-off annihilációjának tulajdonítjuk.

*Stewart és Briscoe* (1967) [16] héliumon végzett mérései meglepően konzisztens képet mutattak. Mind az élettartamspektrum hosszú komponenséből, mind a szögkorrelációs görbe keskeny csúcsából egyértelműen tudták azonosítani a pozitronium komponenseket. Más kondenzált gázokon végzett hasonló mérések már nem voltak ilyen sikeresek. *Briscoe* (1968) [17] több gázon vett fel szögkorrelációs görbéket a parapozitrónium csúcs meghatározására, de ezek nagysága kb. háromszor akkorának adódott, mint amekkorára több más élettartammérésből (*Paul* 1958 [18], *Liu és Roberts* 1963 [19]) következtek. Az effektus a kis mennyiségben jelen levő  $O_2$  szennyezés miatt jelenik meg. Argonon (*Spektor* 1971) [20] és nitrogénen (*Spektor és Paul* 1971) [21] elvégzett élettartammérések szintén a fenti  $O_2$  hatást mutatják. Az  $O_2$  szennyezéstől való függést a könnyű szerves folyadékok is mutatják. Ezeknél az élettartamspektrum tisztán két komponensre bontható. Az ortopozitrónium pick-off annihilációjából származó hosszú élettartamú komponens, ezeknél a méréseknél általában megegyezik a szögkorrelációs görbe parapozitrónium csúcsából számolható pozitronium hányaddal. (*Kerr* 1965) [22]. Ezen folyamat hosszú komponensének élettartamát befolyásolja a jelenlevő feloldatlan  $O_2$ , melynek quenchelő hatása függ a ( $o-Ps$ ) komponens képződésétől (*Cooper* 1967) [23].

Folyékony és szilárd szerves halidokban  $I_2$  értéke csökken. Az effektus a következő sorrend szerint függ a halogén atomtól: klorid-jodid-bromid, de kissé a molekula mint egész is hatással van rá (*Kerr és Hogg* 1962) [24].

A hosszú komponens relatív intenzitásának csökkenése a pozitronium képződés csökkenését mutatja, amire *Goldanskij* (1967) [9] a következő pozitron befogási képet állította fel:



### 3.2 Folyadékok

Az első pozitron élettartam-vizsgálatokat folyékony héliumon végezték. Ezeknél a méréseknél a középső élettartam-komponens túlságosan rövid ahhoz (1,9 nsec), hogy a pozitront körülvevő atomok polarizációjával magyarázzuk. Sokkal valószínűbb az a magyarázat, miszerint (He atom —  $e^+$ ) kötött állapot jön létre (*Roelling* 1967) [25]. Hasonlóképp a hosszú élettartamú komponens túl hosszú ahhoz (88 nsec), hogy az ortopozitrónium pick-off annihilációjával magyarázzuk (*Ferrell* 1957) [11]. Ezért ezt a komponenst a buborékban levő ortopozitrónium annihilációjának tulajdonítják (buborékmodell), melyet az ortopozitrónium és a hélium atomok között ható taszító kicserélési erők hoznak létre. A buborék teljes energiája a pozitronium atom nullpont energiájának a térfogati nyomás energiájának és a felületi energiának az összege:

$$E = E_0(R) + \frac{4}{3} \pi R^3 \rho + 4\pi R^2 \sigma,$$

ahol  $\sigma$  felületi feszültség és  $R$  a buborék sugara. Ha a teljes energiát minimalizáljuk  $R$  függvényében, akkor egyensúlyi állapotban, normál nyomáson a buborék sugarára 10–20 angströmöt kapunk. Ha kiszámoljuk a bomlási állandót, amit egyrészt a



buborékban levő ortopozitrónium normál bomlása, másrészt a buborék belsejéből a buborék falába kidiffundáló ortopozitrónium pick-off annihilációja okoz, eredményül 78—89 nsec-ot kapunk, ami jól egyezik a kísérleti értékekkel (Roelling 1967) [25]. Hasonlóan sikeresen magyarázható a buborék modell segítségével a szögkorrelációs parapozitrónium csúcs szélességének nyomásfüggése. (Hernandez és Choi 1969.) [26].

Összetettebb rendszerre a pick-off annihiláció kvantitatív analízise már bonyolultabb feladat. Bisi *et al.* (1970) [27] megvizsgálták gondosan gáztalanított molekuláris folyadékok egyik csoportjában az ortopozitrónium bomlását. Az ő analízisük azt sugallja, hogy minden egyes atom hozzájárul a quencheléshez egy effektív elektron-számmal, ami független a molekulák szerkezetétől. Lényegesen bonyolultabb közelítést alkalmazott Gray *et al.* (1968) [28], akik 193 szerves folyadék élettartamspektrumát mérték meg. Eredményeik szerint korreláció van az ortopozitrónium pick-off annihilációja, és mind a molekulák szerkezete, mind pedig elektromos polarizálhatósága között. Tao (1970) [29] az előbbi és egyéb mérési eredményeket felhasználva levezetett egy korrelációt, a pick-off annihiláció bomlási állandója és a felületi feszültség között a buborék modell segítségével.

### 3.3 Szilárd anyagok

Az ortopozitrónium atom pick-off annihilációjának leírása szilárd molekuláris anyagok esetében is lehetséges, amikor is a pozitronium atomok a szilárd anyagban jelen levő lyukak, üregek belsejében léteznek. A legérdekesebb effektusok a polymeerekben jelentkeznek, amelyekben az utóbbi évek analízisei legkevesebb 3 élettartam komponens létezését tárták fel. Ezen komponensek magyarázatát Brandt és Spirn adták meg (1966) [30] polietilén, politetra fluoroetilén és glicerín spektrumainak analíziséből. Az élettartam spektrumok relatív intenzitásainak hőmérséklet és térfogat függése a következő képet sugallja. A 6. ábrán a polietilén intenzitásainak hőmérsékletfüggése látható (Brandt 1967.) [31].

A leghosszabb élettartamú ( $I_3$ ) komponens növekszik a hőmérséklet, ill. a térfogat növelésével, ami arra utal, hogy az ortopozitrónium pick-off annihilációjából keletkezik az anyag kis sűrűségű részeiben.  $I_1$  csökken a hőmérséklet növelésével, és mindig nagyobb mint  $I_3/3$ . Következésképpen  $I_1$  több komponens összege kell hogy legyen, hiszen ha csak a parapozitróniumból származna, akkor lenne pontosan  $I_3/3$ . Az egyik komponens a parapozitrónium normál bomlásából származik. A második azon parapozitrónium atomok gyors pick-off annihilációjából, amelyek a nagy elektron sűrűségű helyeken vannak lokalizálva. A harmadik komponens pedig az ortopozitrónium gyors bomlásából ered.  $I_2$  csak kevésbé függ a hőmérséklettől, ill. a térfogattól, tehát kísérletileg azon pozitronok annihilációjának tekinthető, melyek nem hoztak létre pozitroniumot (spontán pozitronannihiláció).

A pick-off annihiláció hőmérséklet függését Brandt (1960) [32] a „szabad térfogat” modellel magyarázta. A pozitronium atom egy potenciál eloszlásban mozog, amely minden egyes molekula közelében gyorsan nő (Wallace 1960) [7]. Ha tehát a pozitron minden molekula körül  $V$  térfogattól ki van zárva, akkor az átlagolt, redukált szabad térfogat molekulánként:

$$v = \frac{V_0 - V}{V_0}, \quad \text{ahol } V_0 \text{ a molekuláris cella térfogata.}$$



A pick-off annihiláció oka, hogy a pozitroniumban kötött pozitron hullámfüggvényei átfednek a környező molekulákkal, és így az annihilációs sebesség csökkenni fog ha a szabad térfogat nő.

$I_3$  növekedése  $I_1$  rovására arra utal, hogy a pozitronium atomok kis szabad térfogattól nagyobb szabad térfogatba mennek át. Mint azt Brandt és Spirn bizonyítják [30], az anyag bizonyos kritikus térfogat felett szétesik rendezett rétegekre,  $v_c$  szabad térfogattal és intermolekuláris rétegekre, nagyobb szabad térfogattal. Egyszerű statisztikus megfontolások azt mutatják, hogy ha  $v_f$  az átlagos szabad térfogat molekulánként, akkor annak valószínűsége, hogy a szabad térfogat nagyobb legyen, mint  $v_c$ :  $P_c = \exp(-v_c/v_f)$ . Most tegyük fel, hogy az intermolekuláris rétegekben  $n_0$  ortopozitronium található  $P_c$  valószínűséggel, és  $\lambda_2$  bomlási állandóval. Ekkor természetesen ugyanezek az ortopozitronium atomok a rendezett régióban is lehetnek  $(1 - P_c)$  valószínűséggel, ahol  $\lambda_1$ -gyel annihilálódnak. A teljes ortopozitronium populáció időbeli csökkenését ekkor a következő egyenlet írja le:

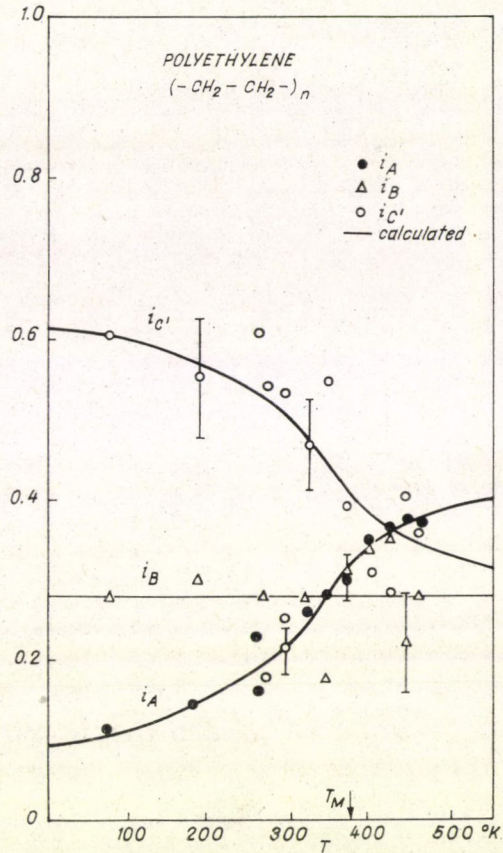
$$n(t) = n(0)P_c \exp(-\lambda_1 t) + n(0)(1 - P_c) \exp(-\lambda_2 t).$$

A fent elmondottak alapján a második tagot azonosíthatjuk a leghosszabb komponenssel, míg az első  $I_1$ -hez ad változó járulékot.

A teflon és polietilén harmadik élettartam-komponensének hőmérsékletfüggését mutatja a 7. ábra (Brandt 1967) [31]. Az ábrán látható trend a szabad térfogat modell alapján magyarázható. A szabad térfogat ugyanis a hőmérsékletnöveledésből eredő sűrűségcsökkenés miatt növekszik. Magasabb hőmérsékleten a rácsvibrációk és sűrűség-ingadozások is fontossá válhatnak. A molekulák termikus mozgásának pedig alapvető hatása az, hogy megnöveli az effektív elektronsűrűséget a szabad térfogatban, és így csökkenti a leghosszabb komponens élettartamát, ugyanolyan sűrűségű hidegrácshoz képest.

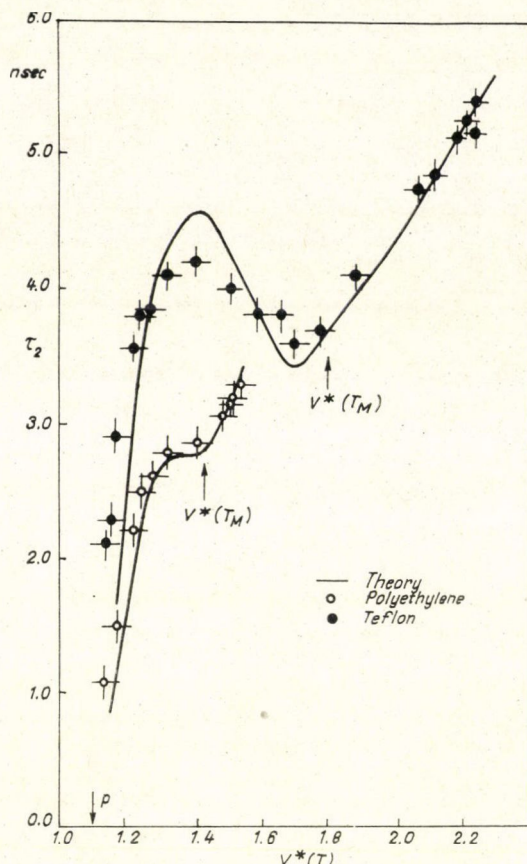
A középső komponensről, amelyet szabad pozitronannihiláció eredményének tekintünk, korábban Tao és Green (1964) [33] azt állították, hogy az ortopozitroniumnak az anyag rendezett régióiban való annihilációjából származik.

A szögkorrelációs mérésnél az ortopozitronium atomok pick-off annihilációjának megfelelő csúcs szélesebb kell hogy legyen, mint a szabad pozitronannihiláció-



6. ábra. A polyethylenen mért élettartamspektrum relatív intenzitásainak hőmérsékletfüggése





7. ábra. Teflonon és polyethylenen mért  
élettartamspektrumok hosszú  
élettartam-komponensének hőmérsékletfüggése

ból származó, a pozitronium atom belső mozgásából származó impulzusjárulék miatt. A Tao—Green hipotézis azt sugallja, hogy az  $I_2$ -nek megfelelő momentum legalább akkora kell hogy legyen, mint az  $I_3$ -é. Doppler eltolódással kombinált élettartammérések azt mutatták, hogy a két impulzus-eloszlás hasonló, de párhuzamosan elvégzett élettartam és szögkorrelációs mérések (Hsu és Wu 1967 [34], Mc Gervey és Walters 1970 [35]) azt találták, hogy a nagy impulzusú eseményekre  $I_3$  nagyobb, mint  $I_2$ . Bár az utóbbi mérések elutasítani látszanak a Tao—Green hipotézist, nem támasztják alá eléggé a szabad annihilációs képet sem. Az is elképzelhető, hogy a középső komponens részben, vagy teljes egészében az illető anyag molekuláihoz kötött  $e^+$ -ok annihilációjából származik.

A fenti helyzet, mint láthattuk meglehetősen bonyolult, bármely kvantitatív elmélet, amely a feloldható pozitronállapotok élettartamát és relatív intenzitását molekuláris anyagokban jól leírná, elég távolinak látszik.



#### 4. Ionkristályok

A Wallace-féle pozitronium képződési kritérium a rendelkezésre álló kísérleti eredményeken alapul, melyek azt mutatták, hogy pozitronium nem jön létre ionkristályokban. *Ferrell* (1957) [11] szintén megmutatta egy módosított Ore rés analízissel, hogy a pozitronium képződés ionkristályokban rendkívül valószínűtlen.

Egy energia-sávokkal bíró, rendezett szilárd anyagban (ionkristályok) az energia feltételben ( $V_g > E > V_i - 6,28$ ) a gerjesztési energia szerepét átveszi az az energia ( $V_1$ ), ami ahhoz kell, hogy egy elektron a legkisebb energiájú betöltetlen állapotba jusson. Ilyen anyagokban a legkisebb energiájú pozitron és pozitronium állapotok is nagyon fontosak. Ha a kristály pozitronaffinitása  $Q_p$  (pozitron affinitáson azt az energiát értjük, ami ahhoz kell, hogy a termalizált pozitront elmozdítsuk a rendszerből) és a pozitronium affinitása  $Q_{ps}$ , akkor az egyenlőtlenség így változik:  $V_1 > E > (V_i + Q_p) - (B. E. + Q_{ps})$ , ahol B. E. a pozitronium kötési energiája. Ha pedig a kristály elektronnaffinitása  $Q_e = V_i = V_1$ , akkor:

$$Q_e + Q_p < Q_{ps} + B. E.$$

Mivel ez a feltétel ionkristályokban általában nem teljesül, a pozitronium képződés tiltott lesz. Egyszerű megfontolások azt mutatják, hogy a pozitron főleg a negatív ionok külső elektronhéján fog létezni. Ezzel a feltevéssel *Ferrell* levezette, hogy a pozitron és elektron affinitások összege kb.  $+(1-2)$  eV. Most becsüljük meg az egyenlőtlenség jobb oldalát. Ha pozitronium létezik tökéletes kristályban, csak intersticiumként helyezkedhet el. Az intersticiális hely azonban limitált, és ha a pozitronium atom normál méreteinél kisebb térbe van beszorítva, kötési energiája csökken, szélsőséges esetben nem marad meg a kötött állapot. Ráadásul a kis tömegű beszorított atom zérópont mozgása hozzá fog járulni a kinetikus energiához, ami *Ferrell* szerint több mint 10 eV. Ebből az következik, hogy a jobb oldal nagy negatív érték, ami a bal oldal  $1-2$  elektronvoltos pozitív értékével összevetve több mint elegendő ahhoz, hogy megsemmisítse az Ore rést. Mindazonáltal meg kell jegyezni, hogy a fenti érvelés erőssége erősen függ a pozitronium atom rendelkezésére álló tértől, és megfelelő méretű üregek, mint pl. ponthibák jelenléte a képet radikálisan megváltoztathatja.

Ionkristályokban végzett korai élettartammérések még csak egyetlen komponens mutattak 0,2 nsec körüli élettartammal. (*Bell és Graham* 1953) [36]. A szögkorrelációs mérések eredményei konzisztensnek tűntek azzal a képpel, hogy a pozitron kötött  $S$  állapotban van egy negatív ion körül. Alkáli halogenideken elvégzett szögkorrelációs mérések alátámasztották a negatív ion külső elektronjain annihiláló pozitronok képét, de konzisztensek voltak egy olyan pozitron hullámfüggvénnyel is, amely majdnem síkhullám, és egyetlen ionra sem lokalizált (*Stewart és Pope* 1960) [37]. A lítium-hidrát szögkorrelációs mérése bonyodalmakat hozott be az interpretációba a delokalizált pozitron állapotok kérdésében (*Stewart és March* 1961) [38], míg végül megmutatták, hogy a résztvevő elektronok elégtelen leírásából származik (*Brandt* 1966) [39].

Hogy a delokalizált pozitron állapotok még nem merítik ki a lehetőségeket, bizonyította, hogy alkáli halidokban felfedezték a hosszú élettartamú komponenseket (*Bisi* 1963) [40]. További vizsgálatok azt mutatták, hogy a mágneses quenchelés túl kicsi (*Bisi* 1964), [41], a  $3\gamma/2\gamma$  arány pedig túl nagy (*Gainotti* 1964 [42], *Bisi* 1966



[43]) ahhoz, hogy a hosszú komponens egyszerűen a pozitronium atom bomlásából származzon. Pontosabb mérések elárulták, hogy bizonyos anyagokban legalább 3 komponens van jelen (*Bussolati et. al 1967*) [44]. Ezek a kutatók azt sugallták, hogy a fő komponensek egy (pozitron-negatív ion) kötött rendszer alap —, és első gerjesztett állapotainak bomlásából származnak, melynek létezését *Goldanskij* (1965) [45], megfogalmazta. Később *Brandt* (1967) [31] a hosszú komponens magyarázatára az  $A$ -centrum modellt javasolta, amely pozitron-negatívhibahelyen való elfogását jelenti. Az annihilációs vagy  $A$ -centrumok listáját *Brandt* a következőképpen állította össze:

- $(+ (e^+))$  vakancia  $A$ -centrum ( $F$ -centrum fordítottja)
- $(+ (e^+ e^-))$  vakancia  $A'_-$ -centrum ( $F'$ -centrum fordítottja)
- $(- (e^- e^+))$  vakancia  $A'_+$ -centrum ( $F'$ -centrum fordítottja)
- $((e^+) -)$  intersticiális  $A$  centrum (Wheeler komponens)

Ezen állapotok némelyikének létezését már sok kísérlet bizonyította, és a pozitronium, valamint a (pozitron-negatív ion) kötött állapotok létezésének valószínűsége felújította az elméleti érdeklődést is, mind a (pozitron-elektron), mind a pozitron-negatív ion) kötött állapotok vizsgálatára.

## 5. Fémek

### 5.1 $A$ szabad elektron közelítés

Azok az elméleti megfontolások, amelyek tökéletes ionkristályokban tiltják az pozitronium képződést, fémes rendszerekre is érvényesek. A legtöbb fém élettartam-spektrumában egyetlen komponens jelenik meg utalva az annihilálódó pozitronok közös állapotára.

A pozitron taszító ionpotenciálok között mozog, és mint azt elméleti számítások mutatják termalizálódott, kváziszabad állapotból fog annihilálódni, közel a vezetési sáv aljához. Mivel a Coulomb taszítás kizárja a pozitronok kölcsönhatását az iontörzssel, az annihiláció főleg a vezetési elektronokon megy végig. A vezetési elektronokat szabadnak feltételezve, a spin-független szabad elektron hullámfüggvények egy gömb alakú Fermi felületet definiálnak.

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{v}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}$$

$k_- < k_F$ -ig, ahol  $k_F$  a Fermi momentum. Hasonlóan definiálva a pozitronokra a zérushőmérsékleti állapotokat,  $k_+ = 0$ -ból következik, hogy

$$\psi_+(\mathbf{r}) = 1/\sqrt{v},$$

ekkor a fotonpár impulzus-eloszlása a következő:

$$\Gamma(\mathbf{k}) d^3 \mathbf{k} \sim \sum_{k_- < k_F} \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}_-) d^3 k.$$

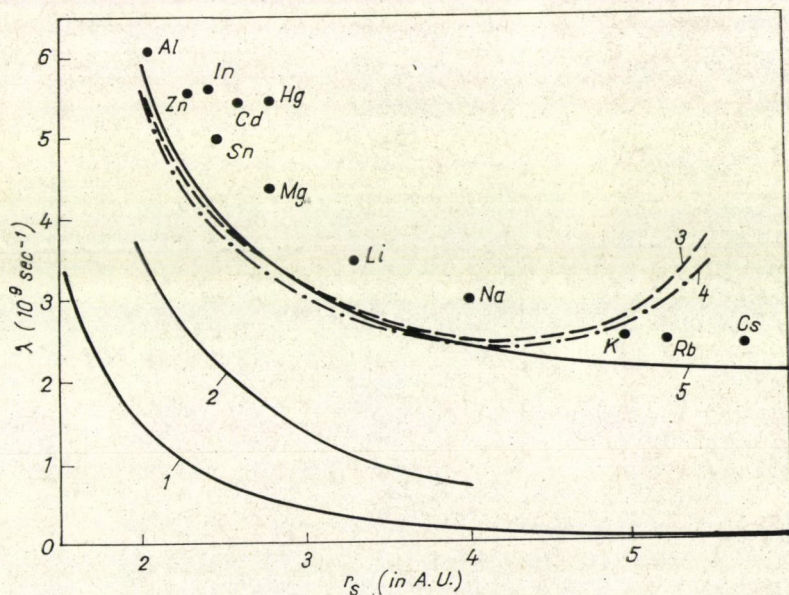
A konvencionális hosszú résű szögkorrelációs berendezés a fotonpár impulzus-eloszlásával arányos mennyiséget mér. Ez az eloszlás, mint azt a későbbiekben rész-



letesen megmutatjuk, egy parabolának felel meg. A parabolikus komponenst több fémnél megfigyelték, és a levágás a Fermi impulzusnál jól egyezik az elméleti várakozással. Időnként megjelenik azonban egy nagyjából Gauss elosztást követő szélesebb komponens is, amely elsősorban az erősebben kötött elektronokon való ún. core-annihiláció következménye. (Berko 1958 [46], Gould 1972 [47]). Bizonyos fémeknél, melyeket éppen ezért egyszerűnek nevezünk, a szélesebb komponens intenzitása elhanyagolható, ezért úgy tekinthetjük, hogy az annihiláció csaknem kizárólag a vezetési elektronokon jött létre. A szögkorrelációs spektrumoknak fent elmondott meglehetősen egyszerű interpretációja, amely még az erős elektron–pozitron közötti Coulomb kölcsönhatást is elhanyagolja (hiszen a szabad elektron spinfüggetlen hullámfüggvényéből indultunk ki), képtelen az eredmények pontos értelmezésére. Ezt szemlélteti a 8. ábra. A pontok, a mért élettartam-spektrumokból számolt értékek, az 1-es görbe az előbb vázolt egyszerű modellnek felel meg. Látható, hogy a mért értékek lényegesen nagyobbak és kevésbé függenek az átlagos elektronsűrűségtől mint az elmélet.

### 5.2 Elektromágneses elméletek

Ha jobban akarjuk közelíteni a kísérleti pontokat, bonyolultabb elméleti számítások szükségesek. Ezek a számítások már figyelembe veszik az elektronok és pozitronok között ható Coulomb erőt, méghozzá korrekcióba véve a kölcsönható elektromágneses árnnyékoló hatását. Ezekre a számításokra bonyolultságuk miatt nem térünk ki, csak berajzoljuk a 8. ábrára a különböző közelítések eredményeit.



8. ábra. Pozitronok bomlási állandója különböző fémekben.

A pontok a kísérleti eredményeket a görbék pedig a különböző elméleteket reprezentálják.

- (1) Sommerfeld modell, (2) Kahana 1963 [48], (3) Kahana 1963 [48]  
(4) Sjölander és Stott 1972 [80], (5) Bhattacharyya és Singwi 1972 [49]



## 6. Kísérleti módszerek

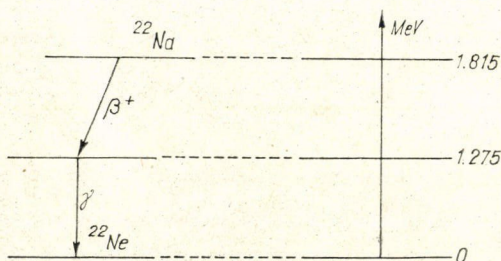
A pozitronannihilációs vizsgálatoknál háromfajta kísérleti technika ismeretes. Ezek az élettartammérés, a szögkorrelációs mérés és a Doppler kiszélesedés mérése. Mi az első kettőt használtuk, melyek sokkal elterjedtebbek, ezért főleg ezekről fogunk beszélni.

### 6.1. Az élettartammérés

Az élettartam-mérés módszerénél azt akarjuk megtudni, hogy a pozitronok mennyi ideig „élnek” az anyagban, mielőtt az ott jelenlevő elektronokkal annihilálódnak.

A felezési időket is figyelembe véve két  $\beta^+$  bomló izotóp látszik pozitron forrásként a legalkalmasabbnak, a  $\text{Na}^{22}$  és a  $\text{Cu}^{64}$ . A  $\text{Na}^{22}$  felezési ideje 2,58 év, és  $\beta^+$  bomlása 0,54 MeV-es pozitronokat termel. A  $\text{Cu}^{64}$  felezési ideje sokkal rövidebb, mindössze 12,8 óra, így használata néhány speciális esettől eltekintve nem előnyös.

Nézzük meg a  $\text{Na}^{22}$  bomlási sémájának bennünket érdeklő részét:

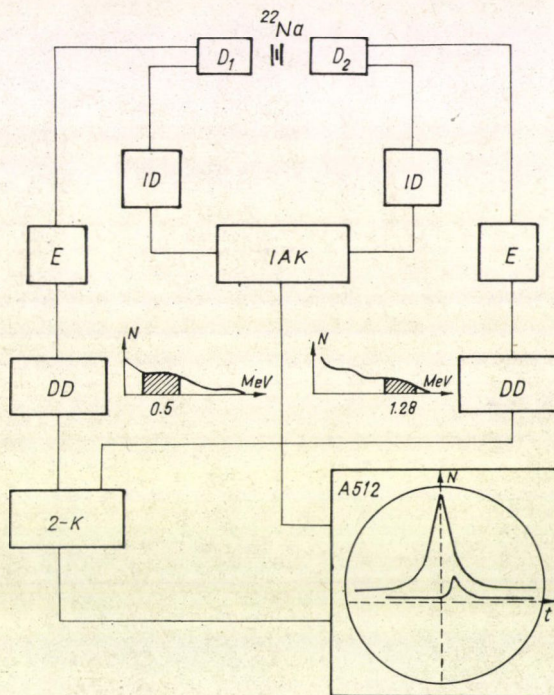


Láthatjuk tehát, hogy a kirepülő pozitronokkal gyakorlatilag egyidejűleg, messze túl a mérhetőség határán, egy 1,275 MeV-es  $\gamma$  sugárzás is észlelhető (a pozitronok és a  $\gamma$  kb.  $10^{-11}$  sec-on belül keletkeznek). Tehát ha arra vagyunk kíváncsiak, hogy a pozitronok mikor keletkeztek, detektálnunk kell a pozitron „születését” jelző 1,275 MeV-es  $\gamma$ -át. Ha pedig az annihiláció során keletkező, a pozitron „halálát” jelző, két egyenként 0,5 MeV-es  $\gamma$  valamelyikét is detektáljuk, akkor a két esemény közti időtartam lesz az illető anyagban a pozitronok élettartama. A feladatot persze bonyolítja, hogy ezek a mérendő időtartamok igen kicsik, mindössze néhány tized nsec nagyságrendűek. Hogy ez milyen kicsi, azt szemléletesen mutatja az a tény is, hogy 0,1 nsec alatt a fény mindössze kb. 3 cm-t tesz meg. Ilyen kis időtartamok mérésére speciális berendezésre van szükség. A feladatot sokcsatornás analízátorral és idő- amplitúdó konverttel egybekapcsolt gyors-, lassú koincidencia körrel oldjuk meg. A mérőrendszer bloksémáját a 9. ábra mutatja. A gyors ágon az idő, a lassú ágon az energia szerinti szelekciót végezzük. A gyors ágon található gyors integrál diszkriminátorokkal a detektorok spektrumából kivágjuk a zajt, és lehetővé tesszük, hogy minden egyes detektált esemény megjelenésének időpontját pontosan meghatározhassuk. Az így kapott jeleket az idő- amplitúdó konverter alakítja át oly módon, hogy a beérkező, a pozitron „születését”, ill. „halálát” jelző, start és stop jel észlelése között eltelt idővel arányos amplitúdójú kimenőjelet ad. Így kapjuk a



konverter spektrumot, amely csak idő szerint választotta szét az eseményeket, ezért szükséges, hogy ezt a lassú ággal, amelyen végig energia arányos jelek futnak, energia aszerint is kapuzzuk. Ezt a kapuzást, már maga a sokcsatornás analizátor végzi, és így már a kész mérési eredményt, a kapuzott élettartamgörbét tárolja.

Ideálisan a mérés véletlen, ill. szisztematikus hibája sokkal kisebb kellene hogy legyen, mint a mért részletek. Valójában azonban berendezésünknek véges időfelbontása van, és ezért az elraktározott spektrumot úgy kell tekintenünk, mint a valódi élettartamspektrum és a berendezés időfelbontási függvényének konvolúcióját. A berendezés időfelbontását legegyszerűbben úgy kaphatjuk meg, hogy ha a pozitronforrást, azonos geometria mellett, helyettesítjük, pl.  $\text{Co}^{60}$  forrással, amely két szimultán  $\gamma$  kvantumot emittál, és így a tökéletes nulla idő-intervallumot szolgáltatja.



9. ábra. Az élettartammérő berendezés blokk-sémája

Manapság a legmodernebb élettartammérő berendezés felbontása sem jobb, mint néhány száz psec, ami kb. megegyezik a legkisebb mérendő élettartamokkal. Ezért a kísérlet sikere nagymértékben függ a forrás és a minta gondos előkészítése, valamint a jó elektronikus stabilitás mellett a megfelelő statisztikus analízistől. Ezen kívül problematikus a forrás aktivitása is. Ha nagy az aktivitás, akkor rövidebb lesz a mérési idő, ami igen előnyös, különösen ha az elektronika nem túl stabil, de a nagy aktivitás igen erősen megnöveli a véletlen háttérrel, ami viszont megnehezíti, sőt sok esetben lehetetlenné teszi a mérés kiértékelését. Így tehát középutat kell választani. A koincidenca szám növeléséhez zárt geometria szükséges, tehát az, hogy a detek-



torok minél nagyobb térszögben lássák a mintát. Ezt általában úgy valósítjuk meg, hogy a vizsgálandó minta két rétege közé, mintegy szendvicsbe foglaljuk a forrást, és ennek két oldalára kerülnek a detektorok. A forrás általában mint  $^{22}\text{NaCl}$  vizes oldata áll rendelkezésre. Ezt igen gyakran úgy használják, hogy közvetlenül rápárolgatják a mintára, ami nagyon veszélyes, mert megtámadhatja a felületi rétegeket, és az ott végbemenő annihiláció járuléka összezavarhatja az anyag belsejéből kapott spektrumot. A jobbik megoldás, ha a forrást valamilyen ellenálló fólia közé helyezzük, mint pl. a csillám. Ekkor azonban a fóliákat igen vékonyra kell választani (kb.  $1 \text{ mg/cm}^2$ ), hogy a bennük végbemenő önabszorpció elhanyagolható legyen, és figyelembe kell venni az illető fóliára jellemző élettartamot. A csillám ebből a szempontból is megfelelő, mivel a rá jellemző komponens élettartama  $0,4 \text{ nsec}$ , és így nem zavarja meg az ionkristályokban a kötött állapotok annihilációjából keletkező hosszabb élettartam-komponenseket. Végül pedig, mivel az élettartamspektrum általában 2–3 exponenciális tag összege, statisztikusan súlyozott, számítógépes illesztési feladatot kell megoldani a komponensek azonosítására.

### 6.2 A szöghkorrelációs módszer

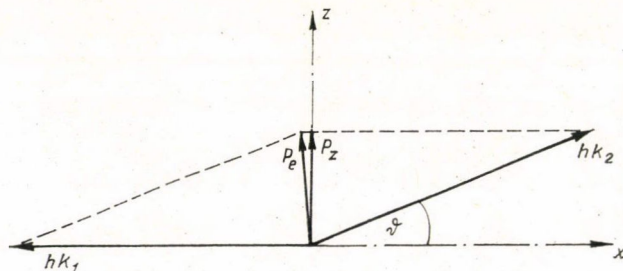
Két  $\gamma$  annihiláció esetén felírhatjuk az impulzus, — és energiamegmaradási tételeket:

$$\begin{aligned}\vec{p}_+ + \vec{p}_- &= \hbar \vec{k}_1 + \hbar \vec{k}_2 \\ \sqrt{m_0^2 c^4 + p_+^2 c^2} + \sqrt{m_0^2 c^4 + p_-^2 c^2} &= \hbar k_1 c + \hbar k_2 c.\end{aligned}$$

Ezek az egyenletek a valóságban a pozitronok termalizációja miatt egyszerűsödnek. Ugyanis eltekinthetünk a pozitronok impulzusától és az elektronok kb.  $10 \text{ eV}$ -nyi energiájától. Így kapjuk, hogy

$$\begin{aligned}\vec{p}_- &= \hbar \vec{k}_1 + \hbar \vec{k}_2 \\ 2m_0 c^2 &= \hbar k_1 c + \hbar k_2 c.\end{aligned}$$

Ebből látható, hogy a  $2\gamma$ -nak nagy összenergiát is kis eredő impulzust kell elvinnie, ami akkor teljesül, ha a következő ábrán látható  $\vartheta$  szög kicsi:



Ekkor

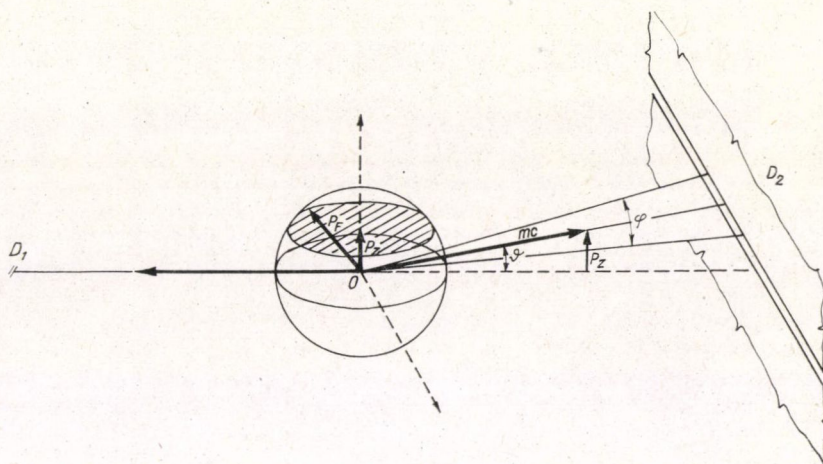
$$\hbar k_1 \approx \hbar k_2 = 0,51 \text{ MeV}.$$

Az ábrából látható, hogy

$$p_z = \hbar k_2 \sin \vartheta \approx m_0 c \vartheta,$$

tehát a szöghkorreláció mérésénél a  $p_z$  eloszlására kapunk információt. Ha speciálisan az elektronokra Fermi eloszlást tételezünk fel, akkor amint a 10. ábrából látható a szöghkorrelációs függvény a következőképpen alakul:





10. ábra. annihiláló pár eredő impulzusa és a Fermi gömb impulzus térben

$$N(\mathfrak{g}) \sim \pi(p_F^2 - p_Z^2) = m_0^2 c^2 \pi(Q_F^2 - \mathfrak{g}^2).$$

Látható tehát, hogy Fermi eloszlást feltételezve a szögkorrelációs görbe parabola.

Stewart 32 fémen végzett méréseket (11. ábra) és azt kapta, hogy  $N(9)$  általában nem parabolikus, hanem inkább Gauss-görbével közelíthető [50]. Az eltérésnek több oka is van:

- a) a fémekben nem valósul meg az ideális Fermi eloszlás, hanem a Fermi impulzusnál nagyobb impulzusú elektronok is vannak;
- b) nemcsak a vezetési elektronokkal való szabad annihilációnak van szerepe, hanem a pozitronok kötött elektronokkal is kölcsönhatnak (core annihiláció);
- c) pozitronium képződés is végbemehet.

Ha az elektronok eloszlására semmiféle kikötést sem teszünk, akkor a szögkorrelációs görbe így alakul:

$$N(\mathfrak{P}) = \int_{p_-} q(\bar{p}) d\bar{p} = 2\pi \int_{p_-}^{\infty} p q(p) dp = 2\pi \int_{\mathfrak{P}} m^2 c^2 \mathfrak{P} \cdot q(mc\mathfrak{P}) d\mathfrak{P}.$$

Innen:

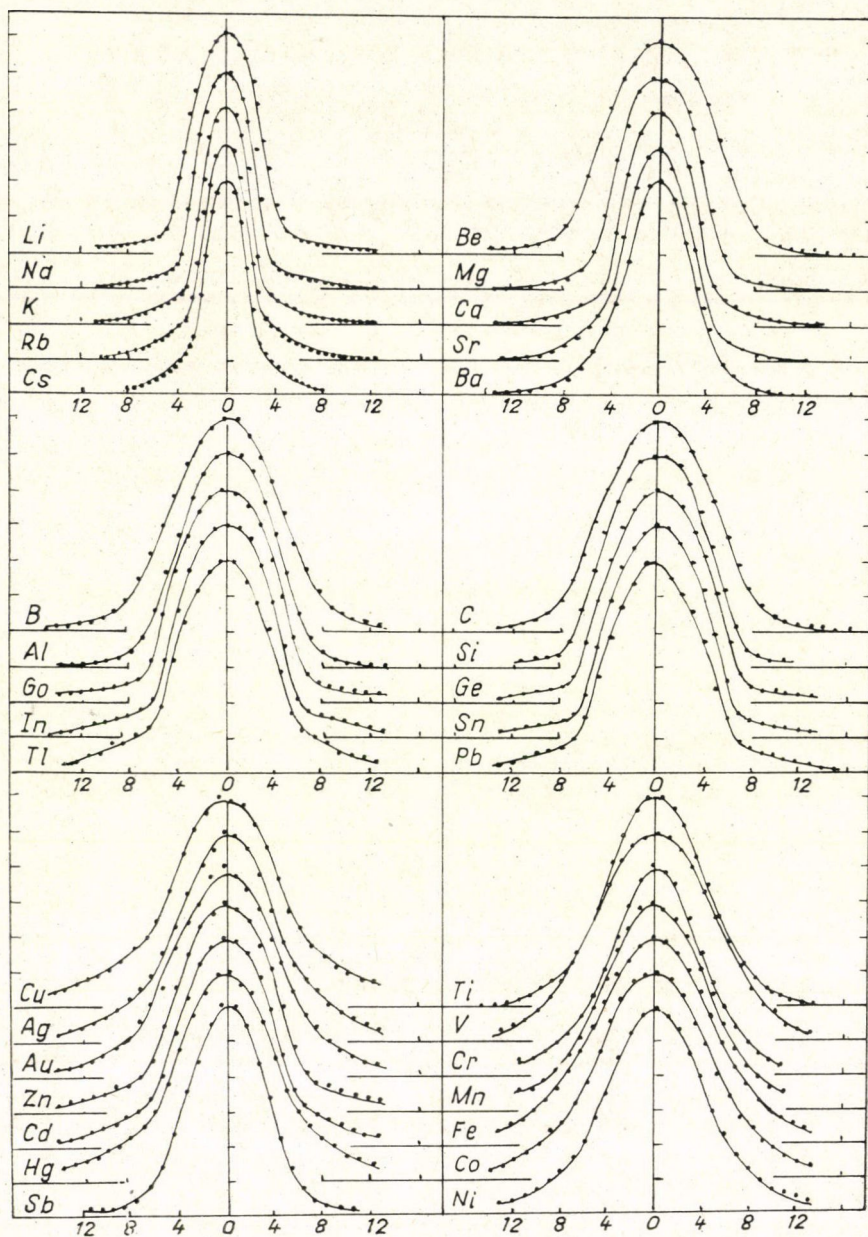
$$Q(p) \sim -\frac{1}{\mathfrak{g}} \cdot \frac{dN(\mathfrak{g})}{d\mathfrak{g}}.$$

A szögkorrelációs mérésekből tehát az elektronok impulzus eloszlására következtethetünk, ami a szilárdtest fizika számára fontos és nehezen megszerezhető információ. Hiszen a szögkorrelációs mérés tetszőleges hőmérsékleten, így szobahőmérsékleten is elvégezhető, míg az egyéb módszerek (De Haas-van Alphen effektus, ciklotron rezonancia stb.) melyekkel még adatokat kaphatnánk a Fermi felület alakjáról, méreteiről igen alacsony, 4 K-os hőmérsékletet igényelnek.

Egy tipikus szögkorrelációs mérőberendezés blokksémáját mutatja a 12. ábra.

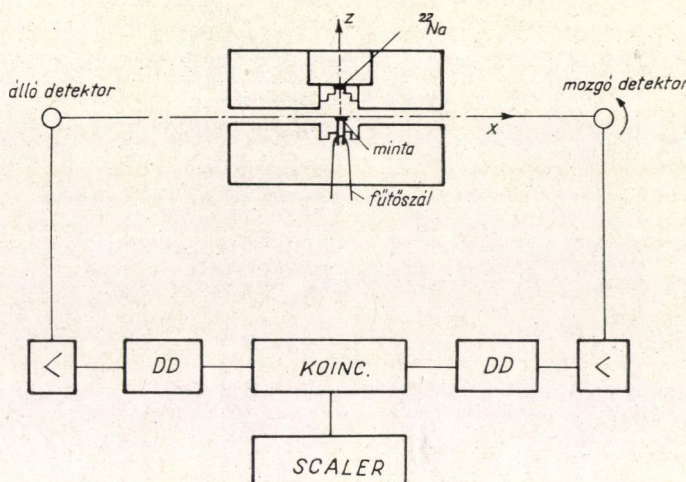
A használt radioaktív forrást, ami leggyakrabban  $^{22}\text{Na}$  vagy  $^{64}\text{Cu}$ , lehetőleg közel helyezzük a mintához, vagy a pozitronokat egy alkalmas mágneses térrel a





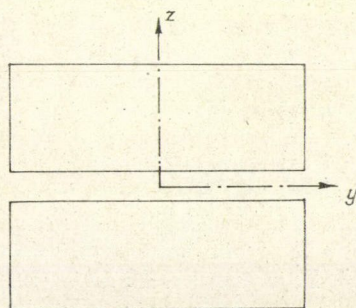
11. ábra. Fémek szögkorrelációs görbéi





12. ábra. A szögkorrelációs mérőberendezés blokk-sémája

mintára fókuszáljuk. Ha rezet vagy valamilyen rézötívözetet akarunk mérni, különösen előnyös a  $^{64}\text{Cu}$  pozitronforrás használata, amely ilyenkor megegyezik a mintával. Az annihílációs fotonokat szcintillációs detektorokkal számláljuk, melyeknek látóteréből többlépcsős ólomárnyékolással kirekesztjük a forrásból származó direkt gammákat. A mérés tulajdonképpen abból áll, hogy a két detektor által észlelt koincidenciákat számláljuk az egyik (mozgatható) detektor helyzetének függvényében. A szögkorrelációs mérési metodikánál fontos a jó szögfelbontás, a jó statisztika, az alacsony véletlen háttér és az elektronikus egységek stabilitása. Ezek a követelmények sokszor ellentmondók, hiszen a jó szögfelbontáshoz biztosítani kell a detektor és a forrás megfelelő távolságát (kb. 2–2,5 m) és többszörös, keskeny résrendszert, (kb. 1 mm), mivel a mérendő szögtartomány igen kicsi (kb. 20 mrad). Ezzel viszont csökkentjük a statisztikát, ami igen hosszú mérési időket eredményez. A hosszú mérési idő azonban igen nagyfokú stabilitást követel meg az elektronikától, és megnöveli a hibát. Ezért a fokozott sugárveszély ellenére a szögkorrelációs méréseknél meglehetősen nagy (10 mCi—1 Ci) sugárforrásokat használunk. A többféle lehetséges geometriából az ún. hosszú réses elrendezés terjedt el legjobban, mert ez valósítja meg a legelőnyösebb kompromisszumot a jó szögfelbontás és a megfelelő statisztika között. A hosszúréses geometriát a következő ábra mutatja:





Láthatjuk, hogy  $z$  irányban a rés igen keskeny a jó szögfelbontás érdekében, de  $y$  irányban hosszú, hogy a koincidencia szám nagyobb legyen. Természetesen a rést csak akkor tudjuk kihasználni, ha mögötte megfelelő hosszúságú szcintillációs kristályt helyezünk el.

További problémát okoz, hogy a pozitronok valamilyen mélységig behatolnak a közeli mintába (ionkristályokban ez kb. 0,2–0,3 mm), és ott annihilálódnak. Ez állandó minta detektor távolság esetén limitálja az elérhető szögfelbontást, másrészt ha a minta felszíne az  $x-y$  síkban fekszik, asszimmetrikus felbontásgörbét eredményez. Ezért a mintát néhány fokkal elforgatva szokták behelyezni a mérőberendezésbe.

### 7. Az élettartamspektrum paraméterei és az élettartammérések interpretációja

Mivel az annihilációs folyamatról feltételezzük, hogy az exponenciális bomlás-törvényt követi, az élettartamspektrum általános esetben a következő alakú:

$$\sum_{k=1}^m A_k \lambda_k \exp \cdot (-\lambda_k t),$$

ahol  $A_k$  és  $\lambda_k$  a  $k$ . komponens bomlási paraméterei,  $A_k$  az intenzitás  $\lambda_k$  pedig a bomlási állandó. A  $k$ . komponens létrehozó pozitronok élettartama:

$$\tau_k = \lambda_k^{-1}.$$

Azt a valószínűséget, amely megadja, hogy egy pozitron a  $k$ . komponensbe tartozék, a  $k$ . komponensnek a teljes spektruméhoz viszonyított területével jellemezzük, és a  $k$ . komponens relatív intenzitásának nevezzük:

$$I_k = \frac{A_k}{\sum_{i=1}^m A_i}.$$

Általában nemcsak az élettartamspektrumok, hanem a szögkorrelációs görbék is több komponensűek, hiszen a pozitronium vagy valamilyen pozitronium-szerű kötött állapot megjelenését egy keskenyebb komponens jelzi. Ezért a szögkorrelációs görbék komponenseihez is rendelhetünk az előzőekkel analóg relatív intenzitásokat. Például pick-off annihiláció esetén a hosszú és keskeny komponensek relatív intenzitásai között az  $I_h = 3 \cdot I_k$  összefüggés teljesül.

Mint már említettük az élettartamspektrumok általában több komponensűek. Ez azt jelenti, hogy pozitronok többféle állapotból annihilálódnak más-más bomlás-állandóval és relatív intenzitással. Ionkristályokban a bomlási spektrumok két- vagy háromkomponensűek, általános esetben tehát a spektrumot háromkomponensűnek feltételezzük, azaz 3 pozitron állapotot veszünk figyelembe. Ez az ún. 3 állapotú modell (Bertolaccini 1971, [51], Brandt és Paulin 1972 [52]), amelyet a 13a ábra szemléltet.



Mindhárom állapothoz tartozik, egy  $\gamma_i$  annihilációs valószínűség, egy  $n_i(t)$  betöltési valószínűség (populáció) és egy oda-, és egy visszaugrási valószínűség. Az első állapotnak termikus pozitronok, a másik kettőnek pedig kötött pozitron állapotok felelnek meg. Ekkor  $K_{23}=K_{32}=0$ , mert annak a valószínűsége, hogy egy pozitron az egyik kötött állapotából közvetlenül átugorjon a másikba elhanyagolható. A modellt kétféleképp fejleszthetjük tovább attól függően, hogy a pozitronok termalizációját (tudjuk hogy ez ionkristályokban viszonylag hosszú, kb. 0,3 nsec) vagy a kötött állapotok kialakulását tekintjük elsődlegesnek.

Ha feltesszük, hogy a kötött állapotok már a pozitron lelassulása során, tehát a termalizáció befejezése előtt létrejönnek, akkor stacionárius modellről van szó. Azért nevezzük stacionáriusnak, mert ebben az esetben a kötött állapotok depopulációja csak annihilációval történhet. A mért bomlásállandók az egyes állapotokból való annihiláció valószínűségével fognak egyezni, az intenzitások pedig a kötött állapotok kialakulási valószínűségeire utalnak. A stacionárius modellt a 13/b ábra szemlélteti.

Látható, hogy az elmondottaknak megfelelően a  $K_{ij}$  átmeneti valószínűségek nullák. A  $k$ . állapot bomlására tehát írhatjuk, hogy:

$$\frac{dn_k(t)}{dt} = -\gamma_k n_k(t).$$

Megoldva a differenciálegyenletet, kapjuk, hogy:

$$n_k(t) = n_k(0) \exp(-\gamma_k t).$$

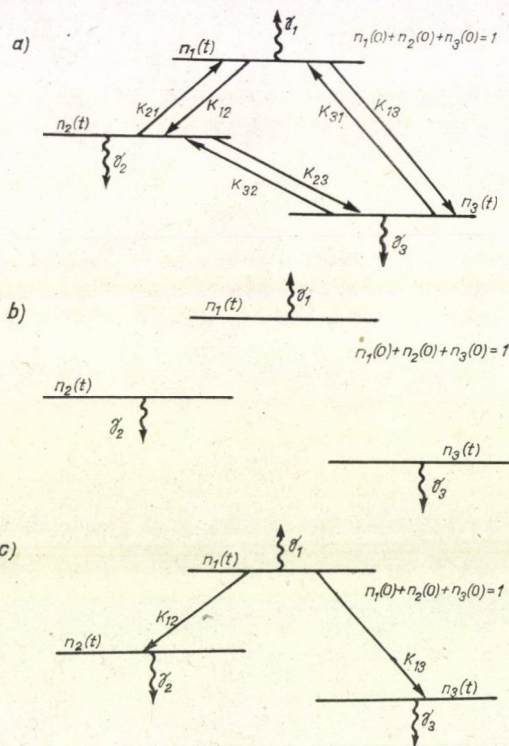
A teljes populáció pedig:

$$n(t) = \sum_{k=1}^3 n_k(0) \exp(-\gamma_k t).$$

Élettartammérésnél a szétsugárzott pozitronok számát, tehát a teljes populáció időbeli csökkenését mérjük. Így a bomlászörbe a következő alakú:

$$\begin{aligned} f(t) &= -\frac{dn(+)}{dt} = \\ &= \sum_{k=1}^3 n_k(0) \gamma_k \exp(-\gamma_k t). \end{aligned}$$

Diffúziós modellről akkor beszélünk, ha feltételezzük, hogy csak a lelassult termikus pozitronok fogódhatnak be a kétféle kötött állapot valamelyikébe, és a kötött állapotok elég stabilak, azaz ott-tartózkodásuk időtartama sokkal hosszabb, mint a pozitron élettartama. Ezt a helyzetet a 13/c ábra szemlélteti.



13. ábra. A háromállapotú modell  
a) általános, b) stacionárius, c) diffúziós



Az egyes állapotok populációja ekkor a következő differenciálegyenletek szerint változik:

$$\frac{dn_1(t)}{dt} = -(\gamma_1 + K_{13} + K_{12})n_1(t)$$

$$\frac{dn_2(t)}{dt} = K_{12} \cdot n_1(t) - \gamma_2 \cdot n_2(t)$$

$$\frac{dn_3(t)}{dt} = K_{13} \cdot n_1(t) - \gamma_3 \cdot n_3(t).$$

Ha a kezdeti feltételek:  $n_1(0)=1$ ,  $n_2(0)=n_3(0)=0$ , akkor a teljes populáció:

$$n(t) = \sum_{k=1}^3 n_k(t) = \left(1 - \frac{K_{12}}{\lambda_1 - \lambda_2} - \frac{K_{13}}{\lambda_1 - \lambda_3}\right) e^{-\lambda_1 t} + \\ + \frac{K_{12}}{\lambda_1 - \lambda_2} \cdot e^{-\lambda_2 t} + \frac{K_{13}}{\lambda_1 - \lambda_3} \cdot e^{-\lambda_3 t},$$

ahol:

$$\lambda_1 = \gamma_1 + K_{12} + K_{13}, \quad \lambda_2 = \gamma_2; \quad \lambda_3 = \gamma_3.$$

Mivel az élettartamspektrum a teljes populáció fogyásának felel meg, ezért a relatív intenzitások a teljes populáció kifejezésében szereplő együtthatók lesznek:

$$I_2 = \frac{K_{12}}{\lambda_1 - \lambda_2}, \quad I_3 = \frac{K_{13}}{\lambda_1 - \lambda_3}.$$

A kétfajta modell közül mindig azt kell használni, amelyik az adott mérőszorozattal összhangban van.

## 8. Irodalmi áttekintés

A következő részben megpróbálunk kritikai képet adni a pozitron annihiláció irodalmáról. Bővebben csak a minket érintő ionkristályokon végzett mérésekre térünk ki.

### 8.1. Kötött pozitronállapotok ionos anyagokban

Mint már a 4-es pontban említettük, a korai pozitronannihilációs mérések még nem tudták a spektrumokat több komponensre feloldani [36]. Komplex élettartamspektrumot *Bisi*-nek sikerült először mérnie 1963-ban [40]. 1967-ben *Bussolati* jobb időfelbontást használva újra mérte az alkáli halidok élettartamspektrumait, és az összes mérést legalább két komponensre bontotta fel [44], amelyeket akkor *Goldsanskij* javaslatára egy pozitron-negatív ion kötött rendszer alap- és első gerjesztett állapota bomlásának tulajdonítottak. Ennek az interpretációnak a módosítását sugallta *Bertolaccini* és *Dupasquier* 1970-ben, amikor szilárd és folyadék fázisban mértek alkáli halogéneket, és a fázisátmenet környékén a spektrumban erős válto-



zást észleltek [53]. Ez a megfigyelés az előző kötött állapot ellen szól, és ezért megalkották az ún. trapping-modellt, amely pozitronok hibahelyek általi elfogását jelenti. Ezzel a modellel jól tudták magyarázni a komponensek csökkenését az olvadáspontnál. Egy évvel később Bertolaccini 44 ionkristályon végzett élettartam méréseket, és mindegyiken legalább két komponenst talált [51]. A trapping-modellt alkalmazva erős korrelációt figyelt meg a rövidebb élettartam-komponens bomlási állandója ( $\lambda_1$ ) és a kristályok jellemzői között. A kristály azon térfogata, amelyet pozitív ionok foglalnak el, nem férhető hozzá a pozitronok számára. A megmaradó régiót a negatív ionok töltik ki, melyeknek sűrűségére az alábbi összefüggést írta fel:

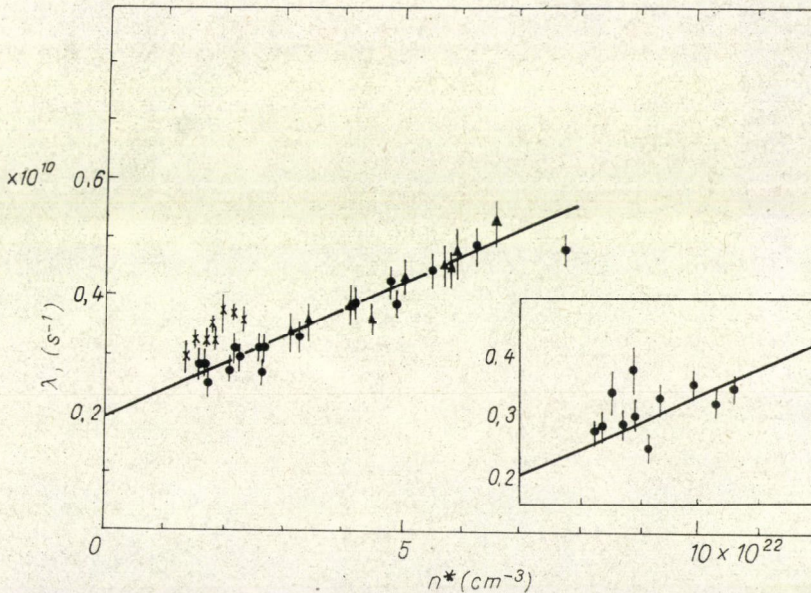
$$n^* = \frac{nv_-}{1 - 4/3 R_+^3 \pi + nv_+}, \quad \text{ahol:}$$

$n = \rho \frac{N_0}{M}$ ,  $\rho$  a sűrűség,  $N_0$  az Avogadro szám,  $M$  a molekulasúly,  $R_+$  a pozitív ionok sugara,  $v_-$  és  $v_+$  a negatív, ill. pozitív ionok száma molekulánként. Ha  $\lambda_1$ -et ábrázoljuk az  $n^*$  függvényében egy lineáris összefüggést kapunk:

$$\lambda_1 = \lambda_0 + kn^*.$$

Ezt mutatja a 14. ábra.  $\lambda_0$ ,  $k$  értéke az egyenesből kiszámítható. A szerzők ebből a korrelációból arra következtettek, hogy a pozitron mindenképpen egy negatív ionra lokalizált állapotból bomlik.

Bisi, Dupasquier és Zappa [54], mágneses quencheléssel, ortopozitronium kötött állapot jelenlétét mutatják ki névlegesen tiszta NaCl és LiF kristályokon. További bizonyítékokat szolgáltatottak a pozitronium szerű kötött állapotok mellett a szögkorrelációs mérések. Coussot kvarc egykristály szögkorrelációs spektrumában



14. ábra. Pozitronok bomlási állandója különböző ionkristályokban



figyelt meg egy keskeny csúcsot [55], amely a parapozitronium bomlásának felel meg. Később másoknak is sikerült megfigyelni különböző kvarckristályokon ezt a jellegzetes pozitronium csúcsot. Mágneses quechelés hatására (Greenberger 1970) [56] a várákozásnak megfelelően a csúcs intenzitása megnőtt. Bisi, Gambarini és Zappa [21] megmutatták, hogy a szögkorrelációs görbe keskeny csúcsának a növekedése összhangban van a második élettartam-komponens mintegy, 40 %-os növekedésével, amelynek pozitronium-szerű eredete a mágnesen quanchelés kísérletekből nyilvánvaló volt. Még 1950-ben javasolta De Benedetti szögkorrelációs méréssorozat elvégzését alkáli kloridokon és Na-halogenideken [6]. Az várták, hogy a nagyon valószínű pozitron-negatív ion kölcsönhatás miatt az első sorozat nem mutat majd változást míg a második igen. Tíz évvel később Stewart és Pope valóban végig mérték az elsőbbi sorozatot, és a várákozásnak megfelelő viselkedést tapasztalták [37]. A szerzők azon kísérletei azonban, hogy a mért impulzus eloszlásokat elméletileg is úgy tudják leírni, hogy egyetlen anionon lokalizált egyrészesecsés pozitron hullámfüggvényt használnak, kudarcot vallottak. Összegezve tehát elmondhatjuk, hogy a Ferrell szabály, amely tiltja pozitronium atomok keletkezését tökéletes ionkristályokban, továbbra is érvényes, de más kötött állapotok jelenlétét a kísérletek egyértelműen igazolják. Ezt a kötött állapotot- úgy tűnik- az anion határozza meg, de mégsem tekinthető egyetlen anionra lokalizáltnak.

## 8.2 Pozitroncsapdák alkáli halidokban

### 8.2.1. Kölcsönhatás *F*-centrumokkal

A pozitroncsapdák jelenlétére vonatkozó legerősebb bizonyítékokat azok a kísérletek szolgáltatták, amelyek során a kristályokat szennyezték, vagy valamilyen kezeléssel a kristályokban levő hibahelyek, feltételezett pozitroncsapdák koncentrációját változtatták.

Williams és Ache (1969) proton- és gammabesugárzásnak vetettek alá NaCl és NaF egykristályokat [57]. Azt tapasztalták, hogy a besugárzás hatására a hosszú élettartamú komponens relatív intenzitása megnőtt, hőkezelésre pedig csökkent. Ez azt mutatja, hogy a besugárzás hatására keletkező hibahelyek fogták el a pozitronokat, míg később ezeket kiteperálták a kristályból. A besugárzási folyamat határozatlansága és az időfelbontás gyenge volta azonban nem tette lehetővé a pozitroncsapdák azonosítását.

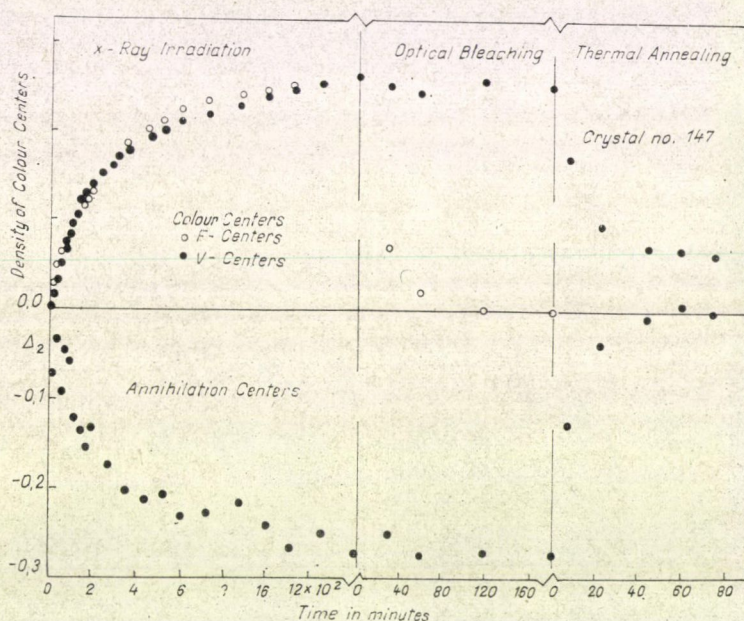
Brand *et al.* [58] NaCl kristály két komponensre felbontott élettartamspektrumát vizsgálták. A kísérlet különböző fázisában paralell mérték az élettartamspektrumot és az optikai abszorpciót. A kezeletlen mintán a kristály hasításából következő mintegy 1 ppm koncentrációban jelenlevő vakanciák már egy kb. 50 %-os relatív intenzitású hosszú komponenszt okoztak. A szobahőmérsékleten végrehajtott kis dóziszú röntgenbesugárzás *F*- és *V*-centrumokat hozott létre a kristályban, és ugyanakkor csökkentette  $I_2$  értékét. Ezután optikai kivilágítással megszüntették az *F* sávot és azt tapasztalták, hogy  $I_2$  nem változott. Végül hőkezeléssel (480 °C) kiteperálták a *V*-centrumokat, aminek hatására  $I_2$  újra elérte a kezdeti értékeit. A folyamatot a 15. ábra mutatja.

A kísérletből az látható, hogy a pozitronok nem hatnak kölcsön az *F*-centrumokkal (lásd második lépés), de valamilyen módon függnek a *V* centrumok koncentrációjától. A többféle lehetséges *V*-centrum közül a szobahőmérsékleten csak az ún.  $V_F$ -centrum



stabil, ami nem más, mint egy pozitív ion vakancia által elfogott lyuk. Ezért kézenfekvő volt az eredményt úgy interpretálni, hogy a  $V$  centrumok képződése miatt a pozitron csapdaként szóba jövő pozitív ion vakanciák száma fogy, és ezért  $I_3$  csökken (lásd 1., ill. 2. lépést). A kísérlet hitelét azonban némileg rontja, hogy a fent közölt ábra szerint az  $F$ -centrumokat kivilágítva a  $V$ -centrumok koncentrációja változatlan, ami felettébb valószínűtlen, mert ezek a centrumok egymástól nem függetlenek. Ezenkívül a szerzők semmit sem közölnek a besugárzási folyamatról, valamint a kristályok tisztaságáról.

Elégé magas  $F$ -centrum koncentráció mellett azonban  $F$ -centrum-pozitron kötött állapotok kialakulását is megfigyelték. Dupasquier 1970-ben mért additive és elektrolitikusan színezett KCl kristályt, amelyben elérte a  $10^{18}/\text{cm}^3$   $F$ -centrum kon-



15. ábra. A hosszú élettartam-komponens relatív intenzitásának változása röntgen besugárzás, kivilágítás és hőkezelés hatására, NaCl kristályban

centrációt, és az adatokat 3 komponensre értékelte ki [59]. Azt tapasztalta, hogy a leghosszabb komponens  $I_3$  együtt nő az  $F$ -centrum koncentrációval, de bomlási állandója  $1,05 \text{ nsec}^{-1}$  független a minta előéletétől. Dupasquier ezt a komponens az anionvakanciában ülő ortopozitronium pick-off annihilációjának tulajdonította. Ez a kötött állapot úgy jön létre, hogy az anionvakanciában ülő elektron ( $F$ -centrum) elfog egy pozitront. A pozitron  $F$ -centrumon való felfogódása nem triviális, hiszen az  $F$ -centrum kifelé semleges, ezért elméleti számításokat végeztek megbecsülésére. Azt kapták, hogy az  $F$ -centrum és a pozitron közötti viszonylag gyenge polarizációs erők elégségesek a kötött állapot létrehozásához, de az aggregát centrumok esetében az energiaviszonyok sokkal kedvezőbbek [60].



Bosi et al. fentiekből kiindulva megvizsgálták pozitronok és  $F'$ -centrumok kölcsönhatását [61]. Az  $F'$ -centrum nem más, mint egy kételektronos  $F$ -centrum. A vára-  
kozásnak és az elméleti becsléseknek megfelelően a pozitronok befogási hatáskereszt-  
metszete az  $F$ -centrumhoz képest kb. egy nagyságrenddel nőtt.

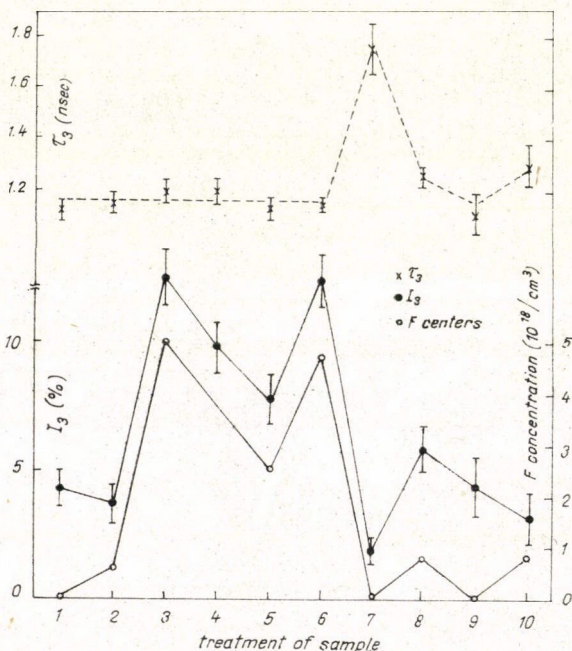
Az  $F$ -centrum pozitron kötött állapot létrejöttét szögkorrelációs mérések is  
alátámasztják. Heinrich és Heriach végzett ilyen méréseket tiszta és additíve színezett  
KCl-on, és a színezett kristályon felvett szögkorrelációs görbét keskenyebbnek talál-  
ták, ami éppen a pozitronok  $F$ -centrumokon való befogódását mutatja [62].

A meglehetősen bonyolult helyzetet Mallard és Hsu próbálták megoldani egy  
következetesen végig vitt mérésorozat elvégzésével [63]. Színezett, fehéritett és hő-  
kezelt KCl kristályminták élettartamát mérték, amint azt a 16. ábra mutatja.

A szerzők szerint a hosszú komponens 3 folyamat eredményeként alakult ki. Ez a  
3 folyamat a következő:

- a) annihiláció szabad, pozitív ionvakanciákból (A-centrum)
- b) annihiláció  $F$ -centrumokból
- c) annihiláció egyéb, a kezelések hatására létrejövő, hibahelyekből.

Az egyes mintakezelési fázisok hatását az élettartamspektrumra a következőképpen  
lehet interpretálni.  $I_3$  kezdeti értéket az a folyamat határozza meg (1). Alacsony dózisu  
röntgenbesugárzásra izolált  $F$ -centrumok, valamint halid intersticiumok alakulnak  
ki, melyek pozitív ionvakanciákhoz kötődnek, és így csökkentik a szabad pozitív  
ionvakanciák koncentrációját (2). Ebben a fázisban az  $F$ -centrum koncentráció és



16. ábra. A hosszú komponens élettartamának és relatív  
intenzitásának változása színezés, fehérités és hőkezelés  
hatására, KCl kristályban



a pozitív ionvakanciák koncentrációja nagyjából megegyezett ( $5 \cdot 10^{17}/\text{cm}^3$ ),  $I_3$  értéke azért csökken, mert azonos koncentrációk esetén a pozitronelfogás valószínűsége pozitív ionvakancián nagyobb mint  $F$ -centrumon. Magasabb  $F$ -centrum koncentrációnál (3, 4, 5, 6), a  $b$ ., folyamat dominál, és  $I_3$  jól korrelál a változó  $F$ -centrum koncentrációval.

A  $250^\circ\text{C}$ -os hőkezelés ionizálja az  $F$ -centrumokat, és ebben a stádiumban mind az  $a$ ., mind a  $b$ ., folyamatot háttérbe szorítja egy  $c$ ., folyamat (7). A 8. lépésben  $I_3$  és  $\tau_3$  valamivel nagyobb, mint a 2.-ban volt, de ez csak a hibák tökéletlen kitemperálása miatt van. További hőkezelés  $450^\circ\text{C}$ -on visszaviszi a kristályt eredeti állapotába (9). Ezek után úgy tűnik, hogy pozitronok elfogódása  $F$ -centrumon kísérletileg tisztázott, bár a szerzők itt sem közölnek semmit a használt kristályminták tisztaságáról.

### 8.2.2. $A$ -centrumok kialakulása

Ha alkáli halogenid kristályba  $M^{2+}$  szennyező iont viszünk be, az alkáli ion ( $1 \times$  pozitív) helyébe beülő  $M^{2+}$  közvetlen közeléből egy másik alkáli ionnak távoznia kell, hogy a kristály elektromosan semleges maradjon, így pozitív ionvakancia keletkezik. Az így keletkező kationvakanciák egy része, a hőmérséklet függvényében szabad (disszociált), míg a fennmaradó rész az  $M^{2+}$  ionokhoz kötött (asszociált) állapotban van. Mint a tömeghatás törvényéből levezethető (Lidiard 1957) [64], az izolált kationvakanciák száma ( $n_v$ ) a bevitt szennyezés koncentráció ( $C$ ) négyzetgyökével arányos:

$$n_v = \sqrt{\frac{C}{Z}} \exp(-E_a/2kT), \text{ ahol: } Z \text{ a pozitív ionok koordinációs száma,}$$

$E_a$  pedig az asszociált kationvakancia-szennyező ionpár képződési energiája.

Tehát, ha a pozitronok a szabad kationvakanciákkal képeznek  $A$ -centrumot, akkor a befogódási valószínűség a szennyező ion koncentráció négyzetgyökével lesz arányos, ha viszont az összes kationvakanciával, akkor a befogási valószínűség a szennyező ionkoncentrációval egyenesen arányos.

Jó ellenőrzési lehetőség a hőmérsékletfüggés is, hiszen mint az előző képletből láthatjuk, ha az izolált kationvakanciákkal való kölcsönhatást tételezzük fel, akkor ez hőmérsékletfüggő, míg ha a pozitronok az összes vakanciákkal kölcsönhatnak, akkor nem túl magas hőmérsékletig, ahol még a szennyezés eredetű vakanciák dominálnak, a pozitronbefogás valószínűsége hőmérséklet-függetlennek adódik.

Singh *et al* [65] 0,1 és  $>5\%$ -os Ba koncentrációval szennyezett KCl kristályokat vizsgáltak, és  $\tau_2$  növekedését tapasztalták, az egyébként 3 komponensre kiértékelt élettartam-spektrumokban. A szerzők a változást a megnövekedett kationvakancia koncentrációnak tulajdonították, ez az értelmezés azonban két okból is téves. Egyrészt ilyen nagy Ba koncentráció nem vihető be a kristályba, hiszen mint az az irodalomból is ismert,  $10^{-6}$  Ba $^{++}$  koncentráció felett a Ba már nem épül be a kristályrácsba, hanem precipitál. Másrészt a vakancia koncentráció növekedését különben sem az élettartam növekedése, hanem a hosszú komponens relatív intenzitásának növekedése kísérné. A szerzők ezen kívül semmit sem írnak az egyéb feltétlenül jelenlevő szennyezőkről.

Hsu *et al* [66], valamint Tumosa *et al* [67] élettartam és szögkorrelációs méréseket végeztek KCl (Ca), KCl (Ag) és NaCl (Al) mintákon. A szennyezések bevitelére min-



den esetben megváltoztatta a mért paramétereket, de kvantitatív következtetéseket nem lehetett levonni a mérésekből.

Az első szisztematikus méréssorozatot *Brandt* és *Waung* végezték el [68]. 0, 60, 90, és 400 ppm  $\text{Ca}^{++}$  koncentrációjú KCl egykristály élettartamspektrumát mérték. Azt találták, hogy a háromállapotú modellt alkalmazva, a 3. komponenshez tartozó befogási valószínűség a  $\text{Ca}^{++}$  koncentráció négyzetgyökével arányos, tehát a pozitronok csak az izolált kation vakanciákkal képeznek *A*-centrumot. A kísérlet azonban több szempontból sem kielégítő. Először is az általuk mért 0 ppm-es pont értelmetlen, hiszen a kristály kb. 3 ppm egyéb  $\text{M}^{++}$  szennyezést is tartalmazott, és az effektust csak olyan koncentráció értékek mellett vizsgálhatjuk, ahol a Ca szennyezés dominál a többivel szemben. Ha pedig a 0 ppm-es ponttól eltekintünk, a maradék 3 pont háromszoros szóráson belül átfedi egymást, ezért rájuk tetszőleges görbe illeszthető. A fentiekén kívül is az interpretáció ellen szól az élettartamspektrum paramétereinek más kísérletek során észlelt hőmérséklet-függetlensége.

Főleg az utóbbi indította a *Dupasquiet* és *Brandt*-ot arra, hogy a kristályokat újra mérjék [69]. Hozzávettek a sorozathoz egy 150 ppm-es pontot is, és az előző eredmény-nyel szemben azt találták, hogy valamennyi jól illeszkedik egy egyenesre. Ebből a lineáris összefüggésből és a befogási valószínűség hőmérséklet-függetlenségéből arra következtettek, hogy a pozitronok az összes kationvakanciával kölcsönhatnak.

Ezt az eredményt sem szemlélhetjük azonban kritika nélkül. A 0 ppm-es pontot mint fizikailag értelmetlent elhagyva az egész vizsgált szennyezésintervallum 60 és 400 ppm közé esik, tehát kisebb mint egy nagyságrend. Ilyen szűk tartományban mért meglehetősen nagy szórású pontokra azonban szinte tetszőleges görbe illeszthető. Mint az időközben magánbeszélgetések során kiderült, *Dupasquiet* is a hőmérséklet-függetlenség, és nem a mért pontok határozott trendje indította arra, hogy éppen egyenest illesszen. Az általunk javasolt, a későbbiekben tárgyalandó új modell azonban egyenes fittelése nélkül is megoldja a hőmérséklet-függetlenség problémáját.

Szólunk a kristály rácsállandója és ezzel együtt a vakanciák mérete is csökken. Ha tehát az *A*-centrum modell igaz, akkor a nyomásváltozást a pozitronoknak észre kell venni, hiszen a kölcsönhatás a vakanciákban ülő pozitron és a környező elektronok között megnő, és így az élettartam csökken. Ilyen méréseket *Le-Blanc* és *Davis* végeztek el 1 és 80 atm. között változtatva a külső nyomást [70]. Több alkálihalogenidet megvizsgáltak, és minden esetben a növekvő nyomással csökkenő  $\tau_2$ -t kaptak, ami megfelel az előbb elmondottaknak.

Összefoglalva tehát megállapíthatjuk, hogy az alkáli halogenidekben lejátszódó annihilációs folyamat még távolról sem tisztázott. Az összetett bomlásgörbe értelmezésére több modell is született. Ezek közül legjobbnak az *A*-centrum modell látszik, ezt támasztják alá a szennyezéskonzentrációtól és nyomástól való függést mutató kísérletek, de ellene szól az észlelt hőmérséklet-függetlenség. Határozott korrelációt találtak ugyanakkor, az annihilációs paraméterek és a sugárzási károsodás, valamint a színcentrumok között is. Továbbra is nyitott kérdés tehát, hogy mikor használható az *A*, ill. az *F*-centrum modell! Az *A*-centrum modellt alkalmazva a pozitronok a kationvakanciák mely részével hatnak kölcsön? Hogyan lehet ezt a kölcsönhatást összeegyeztetni a mért hőmérséklet-függetlenséggel? Ezekre a kérdésekre próbáltunk meg saját méréseinkből választ adni.



## 9. Mérési eredmények

### 9.1 A mérési eredmények részletes ismertetése

#### 9.1.1 A mérés közben elszenvedett sugársérülés vizsgálata

Az ionkristályok röntgenbesugárzás vagy rádióaktív besugárzás hatására, az elnyelt dózistól függően különböző mértékű sugársérülést szenvednek. Triviális példa erre a kristályok elszíneződése, pl. röntgensugárzás hatására, ami színcentrumok keletkezésére utal. Nem mindegy azonban, hogy az elszenvedett sugársérülés milyen nagyságú. Ha a kristály által elnyelt dózis igen nagy, akkor olyan hibahelyek vagy hibahely csoportosulások jöhetnek létre, extrém esetben a kristály még szét is repedezhet, belső felületek, üregek alakulhatnak ki, amelyek erősen befolyásolják az élettartamspektrum paramétereit. Ezért egy konkrét kölcsönhatás előre megtervezett vizsgálatánál tiszta körülményeket kell teremteni, és figyelembe kell venni a minták várható sérülését.

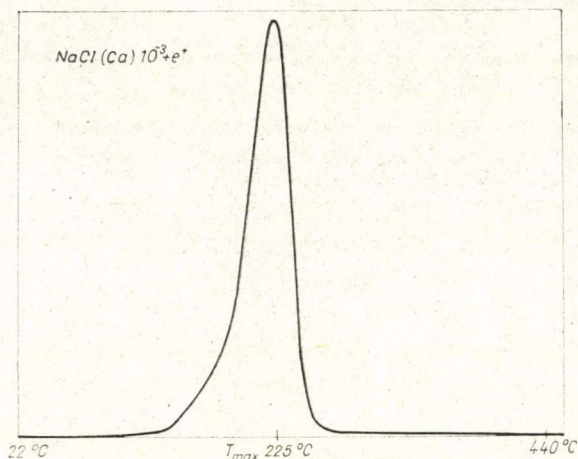
Az elnyelt dózis meghatározására a széles körben elterjedt termolumineszcens dozimetria (TLD) módszere kínálkozott. A TLD azon alapszik, hogy számos anyag pl. a Mn-nal szennyezett LiF (ez a legelterjedtebb), rádióaktív vagy röntgensugárzás hatásának kitéve, majd hevítve fényt emittál. Az emittált fényhozamból következtethetünk az elnyelt dózisa. A jelenség mechanizmusa pontosan még nem tisztázott, sőt az egyes laborok vagy üzemek az alapanyag összetételét is titkosan kezelik. (pl. nem lehet tudni az alapanyag tisztaságát, a hozzáadott szennyezés mennyiségét), de nagy vonalakban a következő folyamat megy végbe. A sugárzás leszakítja a LiF-ban levő  $F^-$  ionok külső elektronját, így elektronok és lyukak ( $F^0$ ) keletkeznek. A keletkező elektronokat az anyagban levő  $Mn^{++}$  ionok (elektroncsapdák) elfogják és így a szobahőmérsékleten stabil állapotok keletkeznek. Hevítés hatására azonban a Mn csapadékból termikusan felgerjesztjük az elektronokat a vezetési sávba, ahol szabadon mozoghatnak, és így rövid idő alatt egy lyuk közelébe érnek és rekombinálnak. E közben a tiltott sávnak megfelelő hullámhosszúságú fényt emittálják. A TLD spektrumnak tehát 3 paramétere van. Az emittált fény mennyisége, az emittált fény hullámhossza és a hőmérséklet ahol a fénykibocsátás végbemegy. Az utóbbi két paraméter a TLD anyag szerkezetétől függ (tiltott sáv szélessége, elektroncsapdák helye a tiltott sávban), az első azonban azt mutatja, hogy adott hőmérsékleten hány csapdában ülő elektront gerjesztettünk ki, ami a sugárzások hatására keletkező elektronok számának, és így az elnyelt dózisnak a függvénye. Ráadásul ez az összefüggés széles dózistartományon belül lineáris, így az emittált fényhozamból az elszenvedett dózis valóban meghatározható.

A mérés elvégzéséhez 2 db pontosan azonos  $Ca^{++}$  szennyezést tartalmazó NaCl egykristályt használtunk. Az egyiket az élettartammérés körülményeinek megfelelő geometria mellett, a méréshez használt  $^{22}Na$  sugárforrással, egy átlagos mérés idejéig (kb. 1 nap) besugároztuk, a másikat pedig ismert dózissal  $^{60}Co$  sugárzásnak tettük ki. Ezután felvettük mindkét kristály TLD spektrumát (17. ábra), és mivel az elszenvedett dózis- fényhozam összefüggés lineáris szakaszán dolgoztunk, egyszerűen meghatározhattuk az elnyelt dózist. Eredményül azt kaptuk, hogy a NaCl (Ca) kristály mintegy 100 R/nap dózist kapott a kb. 5  $\mu Ci$  aktivitású  $^{22}Na$  preparátumtól. Láthatjuk tehát, hogy mivel az elszenvedett dózis igen csekély, nem kell olyan mértékű sugársérüléstől tartanunk, amely befolyásolhatná az élettartamméré-



sek eredményeit. Más a helyzet a szögkorrelációs mérésnél, ahol a használt forrás aktivitása már több mint 3 nagyságrenddel nagyobb. Itt az elnyelt dózis már elérheti a  $10^5$  R/nap értéket, amit a mérési eredmények kiértékelésénél már figyelembe kell venni. A fenti méréssel összhangban van az az egyszerű tapasztalat is, hogy az élettartammérésnél használt kristályok a mérés után sem mutatnak elszíneződést, míg a szögkorrelációs mérésnél használtak igen.

Végül pedig a fenti kísérlet azt is megmutatta, hogy a NaCl (Ca) rendszer is jól használható, mint TLD anyag.



17. ábra. Pozitronokkal besugárzott  $\text{Ca}^{++}$ -al szennyezett NaCl kristály TLD spektruma

### 9.1.2 Pozitron—*F*-centrum kötött állapotok kialakulásának vizsgálata

Mint már az irodalmi összefoglalóban rámutattunk, a pozitronok *F*-centrumon való elfogódásának valószínűsége igen csekély, ezen kötött állapot igazolására elvégzett mérések pedig nem elég meggyőzők. Főleg azért nem, mert a mintaként felhasznált kristályokról vagy semmit sem írnak, vagy az derül ki, hogy az meglehetősen szennyezett és csak ún. kereskedelmi tisztaságú volt. Ilyen körülmények között azonban a mérések nem reprodukálhatók, ill. nem lehetünk bizonyosak abban, hogy a kapott effektus valóban az *F*-centrumoknak köszönhető. Ezért láttuk szükségesnek egy szisztematikus méréssorozat elvégzését igen tiszta és ellenőrzött kristályokon.

Méréseinket különlegesen tiszta KCl egykristályokon végeztük, melyeken röntgenezéssel és additív színezéssel különböző *F*-centrum koncentrációkat hoztunk létre. A kristályokat az MTA Kristályfizikai Kutató Csoportjában Voszka Rudolf vezetésével növesztették. A kristályok növesztésével és tisztításával kapcsolatban az irodalomra utalunk [71], [72]. A bennük levő visszamaradt szennyezések koncentrációja több mint egy nagyságrenddel volt kisebb, mint a más kutatócsoportok által használtakban. Ezek a gyengébb minőségű kristályok, az Oak Ridge-i Kutatólaboratórium által növesztettek vagy ahhoz hasonló minőségűek, és a bennük levő kétvegyértékű szennyezők koncentrációja  $10^{-6}$  mol  $\text{M}^{++}$ /mol K értéket is eléri. Összehasonlításként az általunk használt KCl és NaCl egykristályok szennyezettségét az alábbi táblázat mutatja.



Szennyezés fajtája	Mérési módszer	Koncentráció (mol/mol)	
		NaCl	KCl
Ca <sup>2+</sup> Sr <sup>2+</sup> Ba <sup>2+</sup> Mg <sup>2+</sup>	vezetőképesség mérése	$\sim 2 \cdot 10^{-7}$ $< 2 \cdot 10^{-7}$ $< 2 \cdot 10^{-7}$ $< 2 \cdot 10^{-7}$	$< 4,8 \cdot 10^{-8}$
Pb <sup>2+</sup> Ni <sup>2+</sup> Cu <sup>+</sup> Tl <sup>+</sup> OH <sup>-</sup> O <sub>2</sub>	fotoabszorpciós mérés	$< 10^{-7}$	$< 10^{-7}$

A fotoabszorpciós mérésnél az érzékenységeküszöb  $10^{-7}$  volt, tehát a  $10^{-7}$ -nél kisebb koncentráció azt jelenti, hogy a felsorolt szennyezőknek megfelelő abszorpciós csúcs egyáltalán nem jelent meg. Összefoglalva tehát elmondhatjuk, hogy kristályaink különlegesen tiszták voltak, míg az egyéb publikált mérésekhez használtak csak névleges, kereskedelmi tisztasággal rendelkeztek.

Kristályainkat először röntgenbesugárással színeztük. Erre a célra az MTA Kristályfizikai Kutató Laboratóriumában működő „THX 250” típusú terápiás röntgenkészüléket használtuk fel 200 KV-os nagyfeszültség és 20 mA-es áram mellett. Ekkor a besugárzási dózisteljesítmény kb. 3000 R/perc volt. Az *F*-centrum koncentrációk meghatározására fotoabszorpciós méréseket végeztünk a kristályokon egy „UNICAM SP-700” típusú spektrofotométerrel, és az így kapott besugárzás előtti ( $I_0$ ) és utáni ( $I$ ) intenzitásokból kaptuk az abszorpciós együtthatót:

$$\alpha = \frac{1}{d} \cdot \ln \frac{I_0}{I}, \quad \text{ahol } d \text{ a minta vastagsága centiméterekben.}$$

Az abszorpciós együttható ismeretében a félempirikus Smakula formulából az *F*-centrum koncentráció kiszámolható. (Markham 1966) [73]:

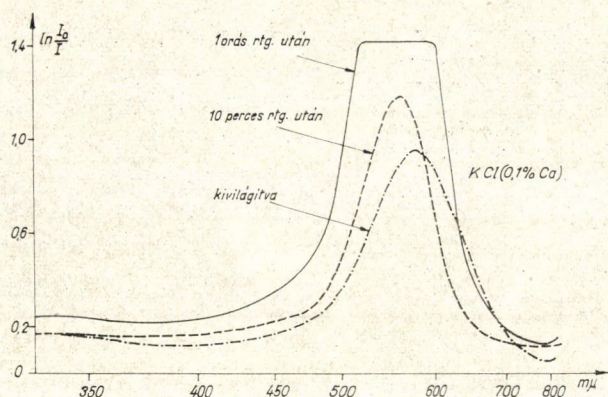
$$n_F = \alpha \cdot c \cdot 10^{16} / \text{cm}^3, \quad \text{ahol a } c \text{ konstans értéke KCl-ra 0,47 (Markham 1966).}$$

A fotoabszorpciós spektrumokat 10 perces és 60 perces röntgenezés, valamint rövid kivilágítás után a 18. ábra mutatja.

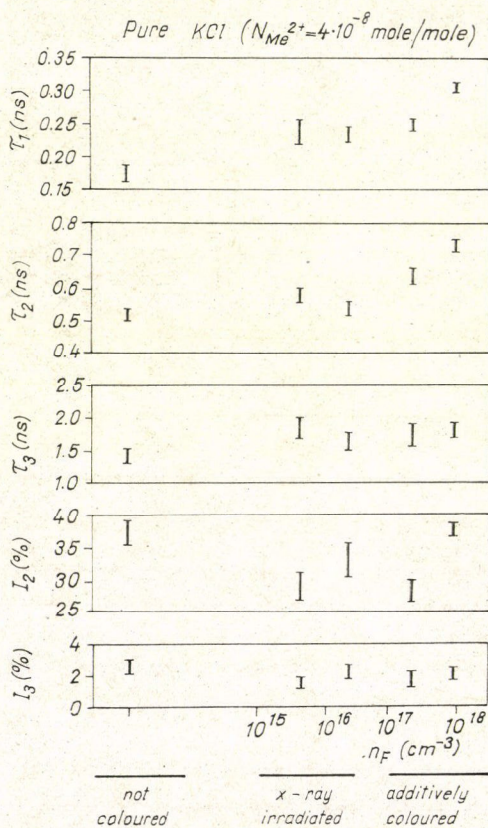
A 60 perces röntgenezés után felvett abszorpciós csúcs levágása csak ábrázolási probléma, mérése nehézséget nem okozott. A fenti 10 és 60 perces röntgenezés hatására a kristályokban  $4 \cdot 10^{15}$ , ill.  $2 \cdot 10^{16}$  *F*-centrum keletkezett  $\text{cm}^3$ -ként. Ezután élettartam-méréseket végeztünk, de a spektrumok között szignifikáns eltérést nem tapasztaltunk. Ezért arra gondoltunk, hogy talán a viszonylag alacsony *F*-centrum koncentráció miatt az effektus túlságosan kicsi. Mivel már a 60 perces röntgenbesugárással is elértük az így kelthető *F*-centrumok telítési szakaszának elejét, a koncentráció növeléséhez más módszert kellett választani. Ezért az additív színezéshez fordultunk, amellyel kb. 1 nagyságrenddel nagyobb *F*-centrum koncentráció állítható elő.

Az additív színezés úgy történik, hogy az alkáli halogenid kristályt az illető alkáli fém gőzében hevítik, majd hirtelen lehűtik. Hevítés közben az alkáli atomok egy része beépül a kristály felületén  $M^+$  alakjában, a leszakadt elektronok pedig





18. ábra. Röntgenezett KCl kristály abszorpciós spektruma



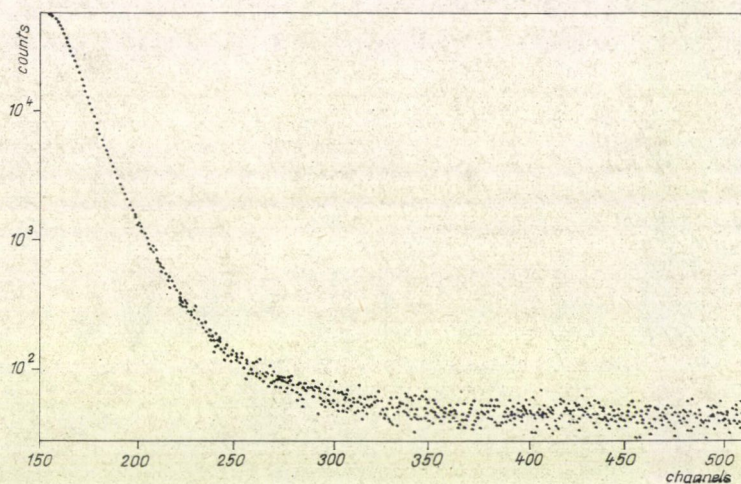
19. ábra. Röntgen besugárzásának és additív színezésnek alávetett KCl kristályokon elvégzett élettartammérések eredménye



a kristályban a vakanciák között diffundálnak. A hirtelen lehűtés az elektronokat befagyasztja a vakanciákba és így, a hevítési hőmérséklettől függően, igen nagy  $F$ -centrum koncentráció érhető el. A fenti módszerrel 600 és 700 °C-on végeztünk additív színezést, és  $2 \cdot 10^{17}$ , ill.  $8 \cdot 10^{17}/\text{cm}^3$ -es  $F$ -centrum koncentrációt keltettünk. Az újra elvégzett élettartammérések azonban ismét negatív eredményt adtak. Az eredményeket a következő táblázat és a 19. ábra mutatja.

A 20. ábrán az additíve színezett és a kezeletlen extra tiszta KCl kristály élettartamspektrumait rajzoltuk fel, jól látható, hogy a két görbe csaknem fedt egymást.

rtg. idő add. szín. $n_F$			$\tau_1$ (ns)	$\tau_2$ (ns)	$\tau_3$ (ns)	$I_2$ (%)	$I_3$ (%)
(perc)	hőm. (°C)	( $1/\text{cm}^3$ )					
10		$4 \cdot 10^{15}$	0,25 (1)	0,58 (2)	1,8 (2)	29 (3)	1,6 (3)
60		$2 \cdot 10^{16}$	0,24 (1)	0,54 (2)	1,6 (1)	33 (3)	2,2 (4)
	600	$2 \cdot 10^{17}$	0,25 (1)	0,63 (3)	1,7 (2)	28 (2)	1,7 (4)
	700	$8 \cdot 10^{17}$	0,31 (1)	0,73 (2)	1,8 (1)	38 (1)	2,0 (3)



20. ábra. Színezetlen és 700 °C-on additíve színezett KCl kristályok élettartamspektruma

Láthatjuk, hogy szignifikáns eltérés seholsem észlelhető, annak ellenére, hogy a  $8 \cdot 10^{17}/\text{cm}^3$ -es  $F$ -centrum koncentráció már elegendően nagy érték.

Összegezve tehát kijelenthetjük, hogy az általunk vizsgált extratiszta KCl egykristályokon az igen nagy  $F$ -centrum koncentráció ellenére sem tudtunk pozitron- $F$ -centrum kötött állapotokat kimutatni [74].

A látszólagos ellentmondás, amely eredményeink és az irodalomban publikált egyéb mérések eredményei között fennáll, véleményünk szerint a kristályok különbözőségében rejlik. Valószínűnek látszik, hogy az ellenőrizetlen szennyezettségű kristályokon mutató effektus nem az  $F$ -centrumoknak, hanem más a kristályokban meglevő szennyezések által generált és a besugárzás hatására az  $F$ -centrumokkal együtt növekvő hibahelyeknek tulajdonítható. Feltevésünk meglehetősen plauzibilis, ha megvizsgáljuk az alkáli halogenid kristályok színezhetőségének néhány kérdését.



Ezen kristályok színeződési mechanizmusa meglehetősen bonyolult, és távolról sem tisztázott. Úgy tűnik azonban, hogy főleg KCl esetén a színezés mechanizmusa és így az  $F$ -centrumok keletkezése is a jelenlevő szennyező ion-pozitív vakancia párokon alapul [75], [76]. Ráadásul mind a röntgenbesugárzás, mind az additív színezés hatására az  $F$ -sávon kívül annak rövid hullámhosszúságú oldalán, az UV tartományban úgynevezett  $V$ -sávok jönnek létre [77], [78]. Ezek a  $V$ -centrumok ún. lyukcentrumok, szemben az  $F$ -centrummal, amelyek elektroncentrumok. Szerkezetük nem más, mint egy alkáli hiányhely által elfogott lyuk. A  $V$ -centrumok keletkezését viszont erősen befolyásolja a kristályban levő szennyezéstartalom, hiszen ha a kristály  $M^{++}$ -t tartalmaz, akkor az ezekhez szükségképpen kötődő alkáli hiányhelyek megnövelik a lehetséges  $V$ -centrumok számát. A  $V$ -centrum pozitron kötött állapot létrejötté pedig nagyobb valószínűséggel bír mint az  $F$ -centrum-pozitroné.

Összefoglalva tehát elmondhatjuk, hogy a mérési eredmények különbözőségének valószínű oka abban rejlik, hogy a kereskedelmi tisztaságú (tehát szennyezett) kristályokon kapott effektus nem az  $F$ -centrumok, hanem más, a kezelés hatására a jelenlevő szennyezésekből kialakuló hibahelyek, valószínűleg  $V$ -centrumok okozták, míg a különlegesen tiszta KCl kristályok esetében ezek a centrumok csak kis koncentrációban alakulhatnak ki. A probléma végleges tisztázására javasoljuk külföldi kristályminták itthoni, ill. saját kristályaink külföldi mérését.

### 9.1.3 $A$ -centrumok kialakulásának vizsgálata

Mint a 8.2.2. pontban elmondtuk, a Brandt által javasolt  $A$ -centrum modell bizonyult legalkalmasabbnak az ion-kristályokban létrejövő hosszú komponens magyarázatára. Ezt a modellt sem tekinthetjük azonban kielégítőnek, mivel ellene szól az élettartamparaméterek hőmérséklet-függetlensége. Dupasquier azon kísérlete, hogy ezt az ellentmondást feloldja, szintén nem meggyőző. A korábban elmondottakon kívül még az is ellene szól, hogy az asszociált, illetve disszociált kationvakanciákban ülő pozitronoknak más más bomlásállandóval kellene rendelkezniük, és így két hosszú komponenset kapnánk. A fenti zavaros helyzet késztetett arra, hogy szisztematikus méréssorozatot hajtsunk végre NaCl ( $Ca^{++}$ ) rendszeren.

Kristályainkat csakúgy mint az előbbieket, az MTA Kristályfizikai Kutató Csoportjában növesztettük, a tisztaságukra vonatkozó adatokat már az előző, (9.1.2) pontban táblázatba foglaltuk. A különböző  $Ca$ -szennyezéseket a tiszta alapanyag (NaCl) visszaszennyezésével nyerték, és a beépült  $Ca$ -koncentrációt vezetőképesség-méréssel határozták meg. Az olvadékhoz hozzáadott, és a kristályrácsba beépült  $Ca$ -koncentrációkat a következő táblázat mutatja:

Ca (mol/mol)	Hozzáadott	$10^{-6}$	$10^{-5}$	$10^{-4}$	$10^{-3}$	$2 \cdot 10^{-2}$
	Beépült	$10^{-6}$	$10^{-5}$	$10^{-4}$	$4 \cdot 10^{-4}$	$4 \cdot 10^{-3}$

Látható, hogy méréseinket igen széles szennyezés koncentráció tartományon végeztük (csaknem 4 nagyságrend), szemben az irodalomban idézett munkákkal, amelyekben az 1 nagyságrendet sem érték el. Az 5 kristálymintán elvégzett élettartammérés eredményét a következő táblázat és a 21. ábra mutatja.



Beépült Ca (mol/mol)	$\tau_1$ (ns)	$\tau_2$ (ns)	$\tau_3$ (ns)	$I_2$ (%)	$I_3$ (%)
$10^{-6}$	0,280 (2)	0,85 (6)	2,3 (7)	6,8 (4)	0,5 (3)
$10^{-5}$	0,285 (3)	0,79 (4)	2,9 (8)	10,0 (6)	0,4 (2)
$10^{-4}$	0,289 (4)	0,72 (3)	2,3 (4)	16,7 (9)	0,7 (2)
$4 \cdot 10^{-4}$	0,317 (5)	0,69 (2)	2,3 (2)	26 (2)	0,9 (2)
$4 \cdot 10^{-3}$	0,340 (1)	0,82 (3)	2,2 (2)	35 (2)	2,2 (6)

Mint látható egyik paraméter sem változik szignifikánsan a Ca koncentráció függvényében kivéve  $I_2$ -t. A II. komponens relatív intenzitása és a beépült Ca koncentráció közötti határozott korrelációra, a súlyozott legkisebb négyzetek módszerével, hatványgörbét illesztettünk, melyre a következő analitikus forma adódik:

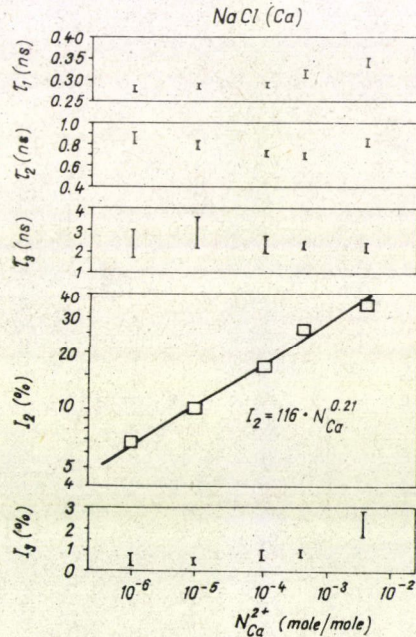
$$I_2 = 116 \cdot N_{Ca}^{0,21}.$$

Az exponens a Brandt [68], ill. Dupasquier [69] által kapott 1, ill. 0,5 helyett 0,2-nek adódik ami azt mutatja, hogy a pozitronok nem hogy az összes kationvakanciával, de még az összes izolálttal sem hatnak kölcsön, csak valamely kisebb frakciójukkal, amely határozottan függ ugyan a szennyezéskonzentrációtól, de számát tekintve az izolált vakanciáknál lassabban növekszik [79].

Olyan modellt kellett tehát keresnünk, amely az eddigi összes kritériumnak eleget téve a következő tulajdonságokkal rendelkezik:

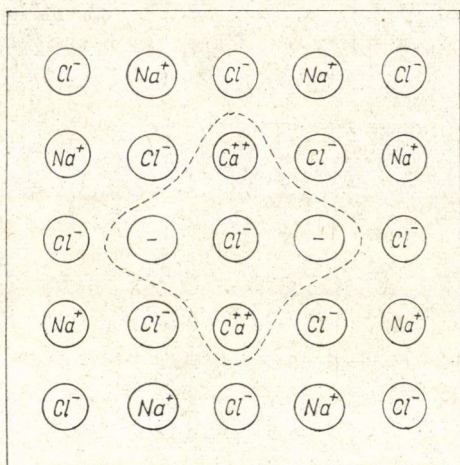
- Határozottan függ a szennyezéskonzentrációtól,
- konzentrációja lassabban növekszik a beépült szennyezés függvényében, mint az izolált kationvakanciáké;
- nyomásfüggő;
- hőmérséklet-független.

A fentieket figyelembe véve új modellként a pozitronok vakancia aggregátumokon (dimérek, trimérek) való elfogódását javasoltuk. A legegyszerűbb vakancia aggregátumot, a dimért úgy képzeljük el, hogy két  $Ca^{++}$ -kationvakancia (dipólus) pár kölcsönhatásba lép egymással. A kölcsönhatás létrejöttét az teszi lehetővé, hogy az ilyen  $Ca^{++}$ -kationvakancia asszociátumok, mint Lidiard 1957-ben megmutatta [64], már szobahőmérsékleten is képesek diffúzióra. Két ilyen dipólus, amely tehát egy dimért alkot, egy  $Cl^-$ -iont fog közre, mégpedig oly módon, hogy a két vakancia a  $Cl^-$ -körül egy nagyobb üreget képez. Ez a konfiguráció lokálisan egyszer negatív töltésű, és így vonzza a pozitront, amely az üregbe bekerülve az anionnal kötött álla-



21. ábra.  $Ca^{++}$ -al szennyezett NaCl kristálysorozaton elvégzett élettartammérések eredménye





22. ábra. Vakancia aggregátum modell (dimér)

potot hoz létre, és mivel az üreg viszonylag nagy, ott sokáig élél. A dimér által kötött  $\text{Cl}^-$ -t a 22. ábra mutatja.

A trimért a dimér analógiájára kell elképzelnünk azzal a különbséggel, hogy nem két, hanem 3 dipólus hozza létre.

Most megmutatjuk, hogy az általunk javasolt új modell rendre kielégíti a korábban felsorolt feltételeket:

a) Nyilvánvaló, hogy a vakancia aggregátumok határozottan függnek a bevitt szennyezéskonzentrációtól, hiszen a dimért alkotó két dipólus mindegyike egy-egy szennyező ion ( $\text{Ca}^{++}$ )-kation vakancia pár.

b) Kézenfekvő az is, hogy a dimérek koncentrációja az izolált kationvakanciáknál lassabban növekszik, hiszen egy dimér létrejöttéhez sokkal erősebb megköté-

seknek kell teljesülni (2  $\text{Ca}^{++}$ -kationvakancia asszociátum léte és kölcsönhatása), mint egy izolált kationvakancia kialakulásához (egyetlen  $\text{Ca}^{++}$  bevitele).

c) A vakancia aggregátumok nyomásfüggése épp oly világos mint az  $A$ -centrumoké, hiszen a megnövekedett külső nyomás miatt csökken a rácsállandó, és ezzel együtt nemcsak az izolált vakanciák, hanem az aggregátumokban levő nagyobb vakanciaüregek mérete is, aminek következtében a benneülő pozitron bomlásállandója növekedni fog.

d) A hőmérséklet-függetlenség is plauzibilis feltevésnek látszik, ugyanis a hőmérséklet növelésével az asszociációs és disszociációs folyamatok nagyjából hasonló, de ellentétes előjelű egyenletek szerint fognak változni. Például a dimérek létrejöttének valószínűségét megnöveli, hogy magasabb hőmérsékleten a dipólusok diffúziója megnő, de koncentrációjukat csökkenti, hogy disszociációjuk is meggyorsul. Hangsúlyozzuk, nem várjuk azt, hogy az összes ellentétes előjelű folyamat pontosan kompenzálja egymást, csak azt, hogy az eredmény gyengén függjön a hőmérséklettől, hogy azt az élettartammérésnél már ne vegyük észre.

#### 9.1.4 Precipitátumok és pozitronok kölcsönhatásának vizsgálata

A nagy szennyezéskonzentrációt tartalmazó kristályokban az olvadáshoz a növesztés során hozzáadott szennyezésnek csak egy része képes arra, hogy beépüljön a kristályrácsba, míg a felesleg precipitálódik, szennyezés szigeteket képez. Nem zárhattuk ki eleve annak lehetőségét, hogy a pozitronok precipitátumokkal kölcsönhatva megváltoztatják az élettartam-paramétereket, ezért  $\text{NaCl}$  ( $\text{Ba}^{++}$ ) rendszeren megvizsgáltuk, hogy létezik-e ilyen kölcsönhatás.

A  $\text{NaCl}$  ( $\text{Ba}^{++}$ ) rendszer különösen alkalmas erre a célra, mert az olvadékba bevitt  $\text{BaCl}_2$  négy nagyságrenddel való növelésének hatására a beépült  $\text{Ba}^{++}$ -ionok koncentrációja csak négyszeresére növekszik, tehát mint a következő táblázatból látható a  $10^{-6}$  mol/mol-nál nagyobb  $\text{Ba}$ -szennyezés gyakorlatilag már teljes egészében precipitálódik.



Ba (mol/mol)	olv.-ban	$10^{-6}$	$10^{-5}$	$10^{-4}$	$10^{-3}$
	beépült	$10^{-6}$	$2 \cdot 10^{-6}$	$2 \cdot 10^{-6}$	$4 \cdot 10^{-6}$

A NaCl ( $\text{Ba}^{++}$ ) sorozaton elvégzett élettartammérések eredményeit a következő táblázat és a 23. ábra mutatja:

Precipitált $\text{Ba}^{++}$ (mol/mol)	$\tau_1$ (ns)	$\tau_2$	$\tau_3$	$I_2$ (%)	$I_3$
0	0,29 (2)	0,53 (5)	1,7 (2)	29 (8)	2,2 (4)
$8 \cdot 10^{-6}$	0,32 (1)	0,63 (3)	2,2 (2)	17 (3)	1,4 (2)
$9,8 \cdot 10^{-5}$	0,31 (1)	0,59 (4)	2,0 (2)	21 (4)	1,1 (2)
$9,96 \cdot 10^{-4}$	0,32 (1)	0,65 (3)	2,6 (3)	17 (3)	0,8 (2)

Látható, hogy egyik élettartam-paraméter sem mutat szignifikáns változást a növekvő precipitátum koncentráció hatására, tehát a pozitronok igen gyengén, vagy egyáltalán nem hatnak kölcsön a precipitátumokkal, így azok méréseinket nem befolyásolják [74].

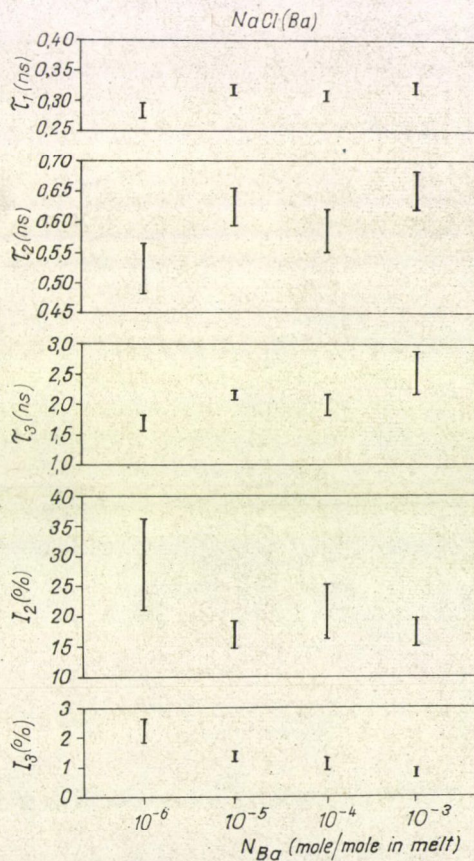
#### 9.1.5 Szögkorrelációs berendezés építése

A következőkben áttekintjük azokat a problémákat, amelyeket a berendezés építése során meg kellett oldanunk, és utalunk azokra a feladatokra is, amelyek még a jövőben várnak megoldásra. A 24. ábra a szögkorrelációs berendezés perspektivikus képét mutatja.

A mechanika egy Dániában már évek óta működő berendezés dokumentációja alapján készült.

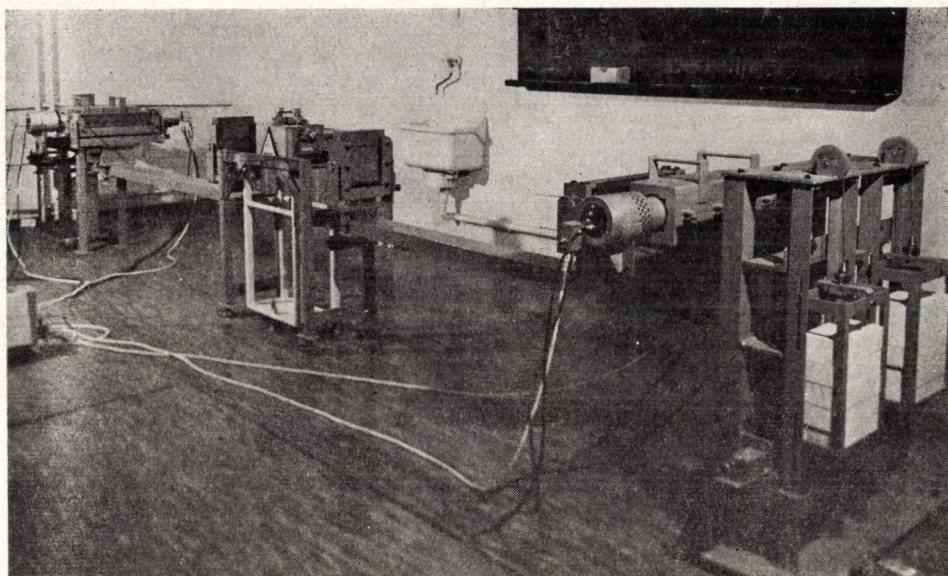
A központi rész tervezésénél a forrás és a minta megfelelő elhelyezését kellett biztosítani, tehát meg kellett oldani, hogy a kettő elég közel legyen egymáshoz, de a detektorok a forrásból származó direkt  $\gamma$ -kat ne lássák. Ezt a feladatot többlépcsős ólomárnyékolással tudtuk megoldani. A központi rész egyszerűsített metszetét mutatja a 25. ábra.

Így az sem fordulhat elő, hogy az ólomvédeleméin annihilálódott pozitronok által keltett gammák a detektorokba jussanak. A központi rész úgy lett tervezve, hogy



23. ábra.  $\text{Ba}^{++}$ -al szennyezett NaCl kristálysorozaton elvégzett élettartammérések eredménye





24. ábra. A szögkorrelációs mérőberendezés perspektivikus képe

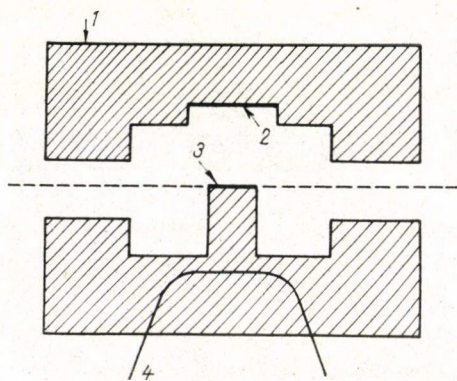
a jövőben a minta hőmérsékletét széles tartományon belül változtatni tudjuk, és a méréseket vákuumban is elvégezhetjük.

Résrendszerül a kettős, hosszúréses elrendezést alkalmaztuk, mert ez a jó szögfelbontás mellett elegendő koincidenencia számot biztosít. A forráshoz közelebb levő rés megakadályozza a szórt gammakvantumok detektor előtti részbe való bejutását. A rés hosszát a szcintillációs kristály hosszúsága szabja meg, erről majd ott szólunk. A résszélesség beállításánál optimumra kell törekednünk, ugyanis, ha pl. a rés szélességét csökkentjük akkor javul a szögfelbontás, de romlik a statisztika. Nálunk jelenleg a résszélesség kb. 1 mm, a detektor forrástávolság kb. 2 m, így a szögfelbontás:

$$\alpha = \frac{10^{-3} \text{ m}}{2 \text{ m}} = 0,5 \text{ mrad.},$$

a maximálisan elérhető koincidenencia szám pedig 1,5 koincidenencia, az általunk használt mintegy 12 mCi aktivitású  $^{22}\text{Na}$  forrással.

Szcintillációs kristálynak NaI(Tl) kristályokat használunk. Különlegességük méretükben rejlik. A jó szögfelbontáshoz mint láttuk keskeny rések szükségesek, ezért a statisztikát csak a szcintillációs kristályok hosszával növelhetjük. Kristályainkat, egyedi darabként, a Gamma Művek Kristálynövesztő Laboratóriumában ké-



25. ábra. A szögkorrelációs mérőberendezés központi részének egyszerűsített metszete  
1 — ólomárnyékolás, 2 —  $^{22}\text{Na}$  forrás,  
3 — minta, 4 — fűtőszál

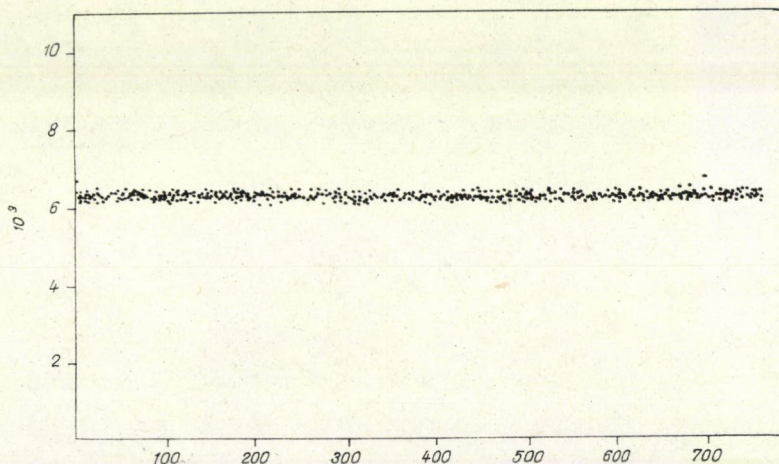


szítették el. Mindegyik fotomultiplierhez két db. egyenként 70 mm hosszúságú kristályból álló rendszer csatlakozik, melyek közös tokban vannak elhelyezve, egyik végükön rugalmasan lezárva, hogy a hőtágulás okozta problémákat kiküszöböljük. Így minden egyes szcintillációs detektorunk 140 mm-es hosszának megfelelő érzékeny detektáló felülettel rendelkezik. A kristályokat azért kellett két darabból elkészíteni, mert 70 mm-nél hosszabb jó minőségű NaI(Tl) szcintillációs kristályt nem tudtak növesztetni. A kristályok energiafelbontása 10% körül van. Egy ilyen két kristályból álló rendszer energia spektruma a felületek reflexiója és a kristály hossza miatt eltér a megszokottól. A spektrum torzul, és több csúcs jelenik meg benne, de ez a mérést egyáltalán nem zavarja.

Méréseinkhez két detektorpárt használunk (1—3, 2—4), és így lényegében egy mérés alatt két szögkorrelációs görbét kapunk, amelyeket normálás után összegezhettünk. Ezzel a módszerrel azonos mérési idő alatt megduplázzuk a statisztikát.

A mozgó detektor oldal mozgását egy 24 V-os egyenfeszültséggel működő léptető motor végzi, amellyel a berendezés mozgókarját a detektorokkal együtt a forrás alatt elhelyezett minta mint középpont körül a résrendszerre merőlegesen függőleges síkban tudjuk felfelé és lefelé mozgatni. A pozicionálást automatikusan kellene végezni, de mivel automata rendszerrel még nem rendelkezünk, ezt a műveletet manuálisan egy 5 dekádós számlálószervezet segítségével oldottuk meg, mellyel a mozgó detektorok helyzetének meghatározása 0,01 mm-es, kielégítő pontossággal lehetséges.

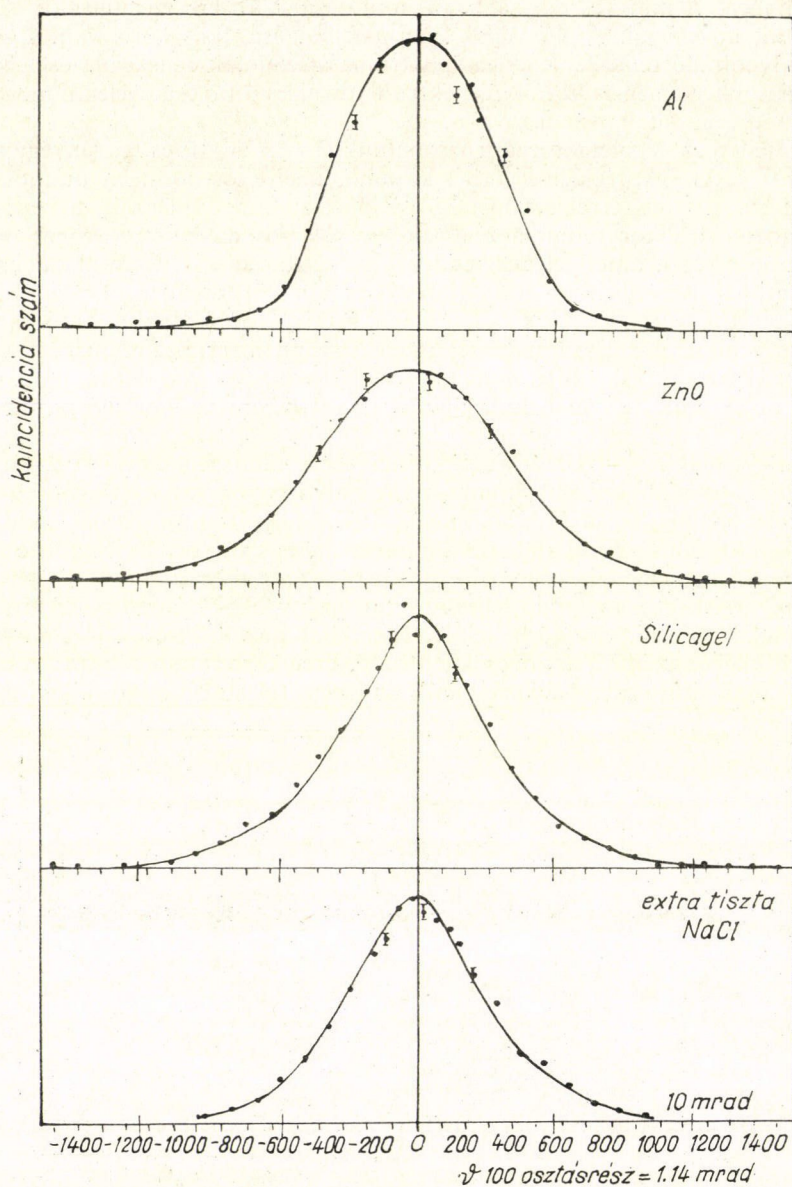
Az elektronika egy közönséges koincidenca rendszer, amellyel szemben a 1,5 koinc./sec-os beütésszám nem támaszt komoly igényeket. Az elektronika blokk-sémáját már 6.2 pontban a 12. ábrán megadtuk. Az egyetlen problémát az időstabilitás okozza, ugyanis a fenti statisztika mellett hiteles szögkorrelációs görbe felvételéhez (kb.  $10^4$  koincidenca csúcsban), mintegy 3 órás mérési idő szükséges szöghelyzetenként. Mivel a mérendő teljes szögtartomány 20—30 mrad és 0,5 mrad-ként kell méréseket végezni, egy görbe felvételéhez kb. 6 nap szükséges. Két párból álló rendszerünkkel ez az idő 3 napra csökkenthető. Ezen három napon belül azonban az elektronikának nem szabad „elmásznia”, ami nem túl stabil elektronikus egysége-



26. ábra. Mozgó detektor — gyors diszkriminátor rendszer stabilitás görbéje



inkkel szemben komoly követelményt jelent. Legkevésbé a detektor-gyors diszkriminátor rendszerek bizonyultak stabilnak. Ezért ezek beállítása jelentette a legtöbb gondot. A beállítás eredményét a 26. ábra mutatja.



27. ábra. Az általunk épített berendezéssel felvett első szögkorrelációs görbék



Jelenleg szögkorrelációs berendezésünk még nincs automatizálva, de várhatóan 1975 folyamán ez is sorra kerül. Ezért röviden összefoglaljuk, hogy az automatarendszernek milyen feladatokat kell majd megoldania.

A központi részben, ahol a forrást és a vizsgálandó mintát is elhelyeztük, szükséges:

- a) a hőmérséklet előre programozható változtatása;
- b) az egyes hőmérsékletek ismételt beállítása;
- c) az adott hőmérsékletek stabilitása.

A detektorok mozgatásával kapcsolatban el kell végezni:

- a) a mérendő szögterület előre meghatározott lépésenkénti letapogatását;
- b) az egyes szöghelyzetek ismételt és nagypontosságú beállítását;
- c) az egyes pozíciókban szükséges mérési idők előre programozható beállítását.

Végül meg kell oldani az egyes pozíciókban mért adatok kiolvasását, rögzítését és kinyomtatását.

A szögkorrelációs berendezés egy sokparaméteres rendszer, hiszen, mindegyik rés két tengely körül forgatható, és függőleges irányban mozgatható, a központi rész pedig a mintával együtt 3 irányban mozgatható, ezért beállítása igen nehéz feladat. A durva beállítást egy teodolit segítségével, míg a finom beállítást egy He-Ne gázlézérrel végeztük, oly módon, hogy több pozícióból végigvilágítva a berendezést a lézernyalábhöz állítottuk a mintát és a réseket.

Azután került sor az ellenőrző spektrumok felvételére. Elsőnek olyan anyagokat választottunk, melyek szögkorrelációs görbéi az irodalomban megtalálhatók, ill. amelyeken a szögkorrelációs görbék várhatóan különbözőnek adódnak. Méréseinket Al, ZnO, szilikagél és NaCl mintákon végeztük. A görbék a 27. ábra mutatja. Elmondhatjuk, hogy a görbék jól egyeznek az irodalomban közöltekkel, ami azt mutatja, hogy berendezésünk helyesen működik [50].

Terveinket illetően először szeretnénk az ionkristályokon elvégzett élettartam-mérések kiegészítésére ugyanezen kristályokon szögkorrelációs méréseket is elvégezni, majd elkezdenénk a fémek szögkorrelációs vizsgálatát...

## 9.2 Mérési eredmények összefoglalása

Az eredmények részletes elemzése után áttekintjük az általunk elvégzett méréseket:

a) az alkáli halogenid egykristályok által a mérés közben elnyelt dózis meghatározása termolumineszcens dozimetria (TLD) segítségével.

Mivel a minta által elszennvedett sugárkárosodás befolyásolja az élettartam-paramétereket, igen fontos a kristály által mérés közben elszennvedett dózis ismerete. Pozitronokkal besugárzott NaCl egykristály TLD spektrumát felvéve, és ismert dózisé,  $^{60}\text{Co}$  besugárzásnak alávetett kristály TLD spektrumával összehasonlítva meg tudtuk mondani, hogy az élettartammérés során elszennvedett dózis mintegy 100 R/nap, ami még nem okoz lényeges elváltozást a kristályban;

b) pozitron-*F*-centrum kötött állapotok vizsgálata.

Pozitron-*F*-centrum kötött állapot létrejötte plauzibilis feltevés; bár a kötést biztosító meglehetősen gyenge polarizációs erők miatt az állapot létrejöttének valószínűsége meglehetősen csekély. Extra tiszta KCl kristályban különböző *F*-centrum koncentrációkat hoztunk létre, és mértük az élettartam-spektrumokat. A spektrumok között szignifikáns különbség nem mutatkozott, ami a fenti kötött állapot ellen



szól. Ez az eredmény ellentmond néhány mások által publikált mérésnek, ezt az ellentmondást azonban a kristályok különböző minőségével magyaráztuk;

c) az *A*-centrum modell vizsgálata.

Az irodalom szerint a kötött állapot kialakulásának legvalószínűbb magyarázata a Brandt által javasolt *A*-centrumok keletkezése. Az *A*-centrum nem más, mint egy pozitív ion hiányhely, azaz kationvakancia által elfogott pozitron. Mivel kationvakanciákat az ionkristályban kétvegyértékű szennyezők bevitelével lehet kelteni, a fenti kötött állapot tanulmányozására célszerűnek látszott olyan kristálysorozat mérése, amely különböző koncentrációjú kétvegyértékű szennyező ionokat tartalmaz. Mivel az irodalom, mint részletesen kifejtettük, e kérdésben sem meggyőző, gondosan előkészített méréssorozatot végeztünk el. Eredményül határozott korrelációt kaptunk a bevitt kétértékű szennyező ionok koncentrációja és az élettartamspektrum, kötött állapotra utaló, hosszú komponensének relatív intenzitása között. Erre a korrelációra hatványfüggvényt illesztettünk, és azt tapasztaltuk, hogy eltér az irodalomból ismerttől. Ezen eltérés alapján az *A*-centrumok helyett új, több oldalról is alátámasztható modellként a pozitronok vakancia aggregátumokon való elfogódását javasoltuk;

d) precipitátumok és pozitronok kölcsönhatásának vizsgálata.

Ennek a vizsgálatnak elvégzésére azért volt szükség, hogy megállapítsuk a nagy szennyezés koncentrációjú kristályokban mindig jelen levő nem oldott, tehát precipitált szennyezők befolyásolják-e eredményeinket. Azt találtuk, hogy a pozitronok ezekkel a precipitátumokkal nem hatnak kölcsön;

e) befejeztük egy korszerű szögkorrelációs mérőberendezés építését, elvégeztük beállítását, és felvettük az első ellenőrző spektrumokat.

Mint arról már írtunk a szögkorrelációs mérések fontos szerepet játszanak a pozitronos kutatásokban. Egyrészt igen jól támogatják az élettartammérések interpretációját, másrészt előnyösen használhatók fémfizikai mérésekre mint fémek, ötvözetek tisztaságának, vezetési tulajdonságainak, Fermi felületük alakjának, méreteinek mérése.

A szögkorrelációs berendezés építése során a következő feladatokat kellett megoldani:

1. mechanika tervezése;
2. központi rész tervezése, sugárforrás-, és minta elhelyezése;
3. megfelelő résrendszer kialakítása;
4. megfelelő detektorok kialakítása;
5. a mozgó detektor mozgatásának megoldása;
6. elektronika;
7. automatika.

Mindezek után kerülhetett csak sor a berendezés geometriai beállítására, amely egy ilyen sok paraméterű rendszernél igen kényes feladat, majd ezután következik az első spektrumok felvétele, melyekkel a berendezés működését ellenőrizzük. Külön szöveltünk a mérés automatizálásáról, amely igen fontos, de nálunk még nem megoldott probléma.



## KÖSZÖNETNYILVÁNÍTÁS

Elsősorban *Dézsi István* tudományos főmunkatártnak tartozom köszönettel, aki mindvégig irányította és támogatta munkámat, valamint *Turchányi György* professzor úrnak (MTA Kristályfizikai Kutató Csoport), aki ezen munka elvégzésére bátorított.

Külön szeretnék köszönetet mondani *Voszka Rudolf* docensnek (MTA Kristályfizikai Kutató Csoport), aki rendelkezésemre bocsátotta a mérésekhez szükséges kristályokat.

Köszönettel tartozom a KFKI Magfizikai Főosztályán működő Pozitron Annihilációs Csoport minden tagjának, akikkel együtt dolgoztam, így *Horváth Dezső*, *Hraskó Péter*, *Kajcsos Zsolt* és *Molnár Béla* tudományos munkatársaknak.

Szeretném megköszönni a segítségét *Szabó Péter Pál* tudományos munkatártnak, aki a termolumineszcens dozimetriai méréseket, ill. *Berkes László* tanársegédnek (SOTE Biofizikai Tanszék), aki az ionvezető képesség méréseket végezte el.

Végezetül pedig szeretném megköszönni *Dézsi Istvánnak* a dolgozatban szereplő ábrák gondos elkészítését.

## IRODALOM

1. A. A. Hijezer, V. Beresztyeckij, Kvantumelektrodinamika. Akadémiai Kiadó, Budapest, 1961.
2. Marx Gy., Kvantummechanika. Műszaki Könyvkiadó, Budapest, 1964.
3. P. Marmier, E. Sheldon: Physics of Nuclei and Particles. Academic Press, New York, London, 1970.
4. P. A. M. Dirac, Proc. Camb. phil. Soc. math. phys. Sci. 26, 361, 1930.
5. J. Lee, G. E. Whiting, Phys. Rev. 91, 1557, 1955.
6. S. De Benedetti, C. E. Cowan, W. R. Konneker and M. Primakoff, Phys. Rev. 77, 205, 1950.
7. P. R. Wallace, Solid St. Phys. 10, 1, 1960.
8. A. Ore, Univ. i Bergen ARbok, Naturvitenskap. Rekke, No. 9., 1949.
9. V. I. Goldanskij, Positron Annihilation. Academic Press, New York, 1967.
10. W. Brandt, H. Feibus, Phys. Rev. 174, 454, 1968.
11. R. A. Ferrel, Phys. Rev. 108, 167, 1957.
12. J. Lee, G. J. Celitans, J. Chem. Phys. 42, 437, 1965.
13. R. N. West, Positron Studies of Condensed Matter Advances in Physics vol, 22, no 3, 1973.
14. G. De Blonde, Can. J. Phys. 50, 1619, 1972.
15. A. Gainotti, E. Germagnoli, Physics Letters 13, 9, 1964.
16. A. T. Stewart, C. V. Briscoe, Positron Annihilation. Academic Press, New York, 1967.
17. C. V. Briscoe, S. I. Choi, A. T. Stewart, Phys. Rev. Lett. 20, 493, 1968.
18. D. A. L. Paul, Can. J. Phys. 36, 640, 1958.
19. D. C. Liu, W. K. Roberts, Phys. Rev. 132, 1633, 1963.
20. D. M. Spektor, D. A. L. Paul: Proc, Second Int. Conf. on Positron Annihilation, Kingston, 1971.
21. D. M. Spektor, D. A. L. Paul, Can. J. Phys. 49, 939, 1971.
22. D. P. Kerr, S. Y. Chuang, B. G. Hogg, Molec. Phys. 10, 13, 1965.
23. A. M. Cooper, G. J. Laidlaw, B. G. Hogg, J. Chem. Phys. 46, 2441, 1967.
24. D. P. Kerr, B. G. Hogg, J. Chem. Phys. 36, 2109, 1962.
25. L. O. Roelling, Pos Ann. Academic Press, New York, 1967.
26. J. P. Hernandez, S. Choi, Phys. Rev. 188, 340, 1969.
27. A. Bisis, G. Ganbarini, L. Zappa, Nuovo Cim. B67, 75, 1970.
28. P. R. Gray, C. F. Cook, G. P. Sturm, J. Chem. Phys. 48, 1145, 1968.
29. S. J. Tao, J. Chem. Phys. 52, 752, 1970.
30. W. Brandt, I. Spirn, Phys. Rev. 142, 231, 1966.
31. W. Brandt, Pos. Ann. Academic Press, New York, 1967.
32. W. Brandt, S. Berko, W. Walker, Phys. Rev. 120, 1289, 1960.
33. S. J. Tao, J. M. Green, Proc. Phys. Soc. 85, 463, 1964.
34. F. H. Hsu, C. S. Wu, Phys. Rev. Lett. 18, 889, 1967.
35. J. D. McGervey, V. F. Walters, Phys. Rev. B2, 2421, 1970.
36. R. E. Bell, R. L. Graham, Phys. Rev. 90, 644, 1953.
37. A. T. Stewart, N. K. Pope, Phys. Rev. 120, 2033, 1960.
38. A. T. Stewart, R. March, Phys. Rev. 122, 75, 1961.
39. W. Brandt, L. Eder, S. Landquist, Phys. Rev. 142, 165, 1966.
40. A. Bisi, A. Fiorentini, L. Zappa, Phys. Rev. 131, 1023, 1963.



41. A. Bisi, A. Fiorentini, L. Zappa, Phys. Rev. 134, A328, 1964.
42. A. Gainotti, Phys. Lett. 13, 9, 1964.
43. A. Bisi, C. Bussolati, S. Cova, L. Zappa, Phys. Rev. 141, 348, 1966.
44. C. Bussolati, A. Dupasquier, L. Zappa, Nuovo Cim. B52, 529, 1967.
45. V. I. Goldanskij, E. P. Prokopjev, Soviet Phys. Solid State 6, 2641, 1965.
46. S. Berko, J. S. Plaskett, Phys. Rev. 112, 1877, 1958.
47. A. G. Gould, R. N. West, B. G. Hogg, Can. J. Phys. 50, 2294, 1972.
48. S. Kahana, Phys. Rev. 129, 1622, 1963.
49. F. Bhattacharyya, L. Singwi, Phys. Rev. Lett. 29, 22, 1972.
50. A. T. Stewart, Can. J. of Phys. 35, 168, 1957.
51. M. Bertolaccini, A. Bisi, G. Gambarini, L. Zappa, J. Phys. C. 4, 734, 1971.
52. W. Brandt, R. Paulin, Phys. Rev. B5, 2430, 1972.
53. M. Bertolaccini, A. Dupasquier, Phys. Rev. B1, 2896, 1970.
54. A. Bisi, A. Dupasquier, L. Zappa: Proc. Second Int. Conf. on Pos. Ann., Kingston 1971.
55. G. Coussot, Phys. Lett. A, 30, 138, 1969.
56. A. Greenberger, A. Mills., A. Thompson, S. Berko, Phys. Lett. A, 32, 72, 1970.
57. T. L. Williams, H. J. Ache, J. Chem. Phys. 51, 3536, 1969.
58. W. Brandt, H. F. Waung, P. W. Levy, Phys. Rev. Lett. 26, 496, 1971.
59. A. Dupasquier, Nuovo Cim. Lett. 4, 13, 1970.
60. A. Berezin, R. Evarestov, Phys. St. Sol. B, 48, 133, 1972.
61. L. Bosi, A. Dupasquier, L. Zappa: publikálás alatt.
62. D. Herlach, F. Heinrich, Phys. Lett. A, 31, 47, 1970.
63. W. Mallard, F. Hsu, Phys. Lett. A, 38, 164, 1972.
64. A. B. Lidiard: Ionic conductivity. Handbook of Phys. XX. 1957.
65. K. P. Singh, R. M. Singru, M. S. Tomar, Phys. Lett. A, 32, 10, 1970.
66. F. M. Hsu, W. Mallard, J. Hadley: Proc. Second Int. Conf. on Pos. Ann. Kingston, 1971.
67. C. S. Tumosa, J. Nicholas, H. J. Ache, J. Phys. Chem. 75, 2030, 1971.
68. W. Brandt, M. F. Waung, Phys. Rev. 133, 3432, 1971.
69. W. Brandt, A. Dupasquier, G. Dürr, Phys. Rev. B6, 3156, 1972.
70. R. LeBland, D. Davis: Proc. Second Int. Conf. on Pos. Ann. Kingston, 1971.
71. R. Voszka, K. Raksányi, L. Berkes, Krist. ind. Technik, 5, 409, 1970.
72. R. Voszka, I. Tarján, L. Berkes, J. Kraisovszky, Krist. und Technik, 1, 423, 1966.
73. J. J. Markham: F-Centers in Alkali Halides, Academic Press, New York, 1966.
74. Á. Balogh, I. Dézsi, D. Horváth, Zs. Kajcsos, Appl. Phys., 197.
75. M. Beltrami, R. Cappelletti, R. Fieschi, Phys. Lett., 3, 10, 1964.
76. C. Bucci, R. Fieschi, G. Guidi, Phys. Rev. 148, 816, 1966.
77. R. Casler, O. Pringsheim, P. Yuster, J. Chem. Phys. 18, 887, 1960.
78. H. Dorendorf, Z. Phys. 129, 317, 1951.
79. Á. Balogh, I. Dézsi, D. Horváth, Zs. Kajcsos, Phys. Letters, A45, 299, 1973.
80. A. Sjölander, M. J. Stott, Solid. St. Com. 8, 1811, 1970.

## SZERZŐK BETÜRENDES LISTÁJA

Ache, H. J. [57], [67]  
 Balogh, Á. [74], [79]  
 Bell, R. E. [36]  
 Beltrami, M. [75]  
 Berezin, A. [60]  
 Berkes, L. [71], [72]  
 Berkó, S. [32], [46]  
 Bereszyeckij, V. [1]  
 Bertolaccini, M. [51]  
 Bhattacharyya, F. [49]  
 Bisi, A. [27], [40], [41], [43], [51], [54]  
 Bosi, L. [61]  
 Brandt, W. [10], [30], [31], [32], [39], [52], [58], [68], [69]  
 Briscoe, C. V. [16], [17]  
 Bucci, C. [76]  
 Bussolati, C. [43], [44]



- Cappelletti, R. [75]  
Casler, R. [77]  
Celitans, G. J. [12]  
Choi, S. I. [17], [26]  
Chuang, S. Y. [22]  
Cook, C. F. [28]  
Cooper, A. M. [23]  
Coussot, G. [55]  
Cova, S. [43]  
Cowan, C. E. [6]  
Davis, D. [70]  
De Benedetti, S. [6]  
De Blonde, G. [14]  
Dézsi, I. [74], [79]  
Dirac, P. A. M. [4]  
Dorendorf, H. [78]  
Dupasquier, A. [44], [53], [54], [59], [61], [69]  
Dürr, G. [69]  
Eder, L. [39]  
Evarestov, R. [60]  
Feibus, H. [10]  
Ferrell, R. A. [11]  
Fieschi, R. [75], [76]  
Fiorentini, A. [40], [41]  
Gainotti, A. [15], [42]  
Gambarini, G. [27], [51]  
Germognoli, E. [15]  
Goldanskij, V. I. [9], [45]  
Gould, A. G. [47]  
Graham, R. L. [36]  
Gray, P. R. [38]  
Green, J. M. [33]  
Greenberger, A. [56]  
Guidi, G. [76]  
Hadley, J. [66]  
Heinrich, F. [62]  
Herlach, D. [62]  
Hernandez, J. P. [26]  
Hijezer, A. A. [1]  
Hogg, B. G. [22], [23], [47]  
Horváth, D. [74], [79]  
Hsu, F. H. [34], [63], [66]  
Kahana, S. [48]  
Kajcsos, Zs. [74], [79]  
Kerr, O. P. [22], [24]  
Konneker, W. R. [6]  
Krajsovsky, J. [72]  
Laidlow, G. J. [23]  
Landguist, S. [39]  
Lee, J. [5], [12]  
Levy, P. W. [58]  
Lidiard, A. B. [64]  
Liu, D. C. [19]  
Mallard, W. [63], [66]  
March, R. [38]  
Markham, J. J. [73]  
Marmier, P. [3]  
Marx, Gy. [2]  
Mills, A. [56]  
McGervey, J. D. [35]



- Nicholas, J. [67]  
Ore, A. [8]  
Paul, D. A. L. [18], [20], [21]  
Paulin, R. [52]  
Plaskett, J. S. [46]  
Pope, N. K. [37]  
Pringsheim, P. [77]  
Prokopjev, E. P. [45]  
Raksányi, K. [71]  
Roberts, W. K. [19]  
Roelling, L. O. [25]  
Sheldon, E. [3]  
Singh, K. P. [65]  
Singru, R. M. [65]  
Singwi, L. [49]  
Sjölander, A. [80]  
Spektor, D. M. [20], [21]  
Spirn, I. [30]  
Stewart, A. T. [16], [37], [38], [50]  
Stott, M. J. [80]  
Sturm, G. P. [28]  
Tao, S. J. [29], [33]  
Tarján, I. [72]  
Tomar, M. S. [65]  
Tumosa, C. S. [67]  
Voszka, R. [71], [72]  
Walker, W. [32]  
Wallace, P. R. [7]  
Walters, V. F. [35]  
Waung, H. F. [58], [68]  
West, R. N. [13], [47]  
Whiting, G. E. [5]  
Williams, T. L. [57]  
Wu, C. S. [34]  
Zappa, L. [27], [40], [41], [43], [44], [51], [54], [61]  
Yuster, P. [77]



# SZERVES KVÁZI EGYDIMENZIÓS ANYAGOK MIKROHULLÁMÚ VEZETŐKÉPESSÉGÉNEK ÉS DIELEKTROMOS TÉNYEZŐJÉNEK VIZSGÁLATA\*

HOLCZER KÁROLY

MTA, Központi Fizikai Kutató Intézet, Budapest

## TARTALOMJEGYZÉK

Bevezetés .....	341
1. Kvázi egydimenziós szerves sók jellemzése .....	344
1.1 Kvázi egydimenziós fémek instabilitásai .....	348
1.2 Korrelációs effektusok .....	348
1.3 Rendezetlenség kvázi egydimenziós rendszerekben .....	349
2. Vezetőképesség és dielektromos állandó .....	351
2.1 A transzporttulajdonságok frekvenciafüggése, dielektromos állandó .....	351
2.2 Irodalmi adatok összefoglalása .....	353
3. A nagyfrekvenciás ellenállás és dielektromos állandó mérése .....	355
3.1 A mérés elve .....	355
3.2 A megépített berendezés leírása .....	358
3.2.1 A berendezés mikrohullámú része .....	358
3.2.2 Frekvencia stabilizálás, elektronikus részek .....	360
3.2.3 Mérési körülmények, a berendezés paraméterei és felbontása .....	361
4. Anyagminták .....	364
5. Kísérleti eredmények .....	366
5.1 Kinolinium (TCNQ) <sub>2</sub> .....	366
5.2 N-metil kinolinium (TCNQ) <sub>2</sub> .....	368
5.3 2—2' és 4—4' bipyridinium (TCNQ) <sub>2</sub> .....	369
6. Az eredmények értelmezése .....	371
6.1 Belső rendezetlenséget nem tartalmazó anyagok .....	372
6.2 Belső rendezetlenséget tartalmazó anyagok .....	373
7. Összefoglalás .....	374
Köszönetnyilvánítás .....	377
Irodalomjegyzék .....	577

## Bevezetés

Az utóbbi néhány évben a szilárdtest fizikusok világszerte egyre növekvő figyelmet szenteltek a szerves charge-transfer sók vizsgálatának [1]. Az érdeklődés élénkülésének oka néhány olyan anyag felfedezése volt, melynek vezetőképessége fémes jellegget mutatott. A remény, hogy szerves anyag nemcsak fém, de szupravezető is

\* Egyetemi doktori értekezés.  
Érkezett 1976. dec. 14.



lehet, a kutatás egyik vissza-vissza térő izgalmas problémája. Elméleti részről a figyelmet az anyagok jellegzetes láncszerű szerkezete keltette fel, az eddig csak szinte oktatási célokra kidolgozott egydimenziós (1d) modellek alkalmazhatósága vált lehetővé. A terület gyors fejlődése az anyagok nagy változatosságának, szokatlan tulajdonságaiknak, s az elméleti és kísérleti kutatások gyors egymásra találásának egyaránt köszönhető.

A kutatás egyik fő célja az elektromos vezetési mechanizmusok megértése, így a vezetőképesség mérésének centrális szerep jut. A hagyományos egyenáramú vezetőképesség mérése mellett egyre fontosabbá vált egy speciális mikrohullámú vezetőképesség-mérési módszer, melyet először *L. I. Buravov* és *I. F. Segolev* írt le [2]. (A világon tudomásunk szerint 5 laboratóriumban folynak ilyen vizsgálatok a KFKI-n kívül.) Ennek a technikának a vizsgálati módszerek körébe való bevonását több tényező motiválta:

a) a vizsgált anyagok általában néhány mm hosszú tized-század mm vastag tű alakú kristályok, ezekre a szokásos egyenáramú vezetőképesség méréshez szükséges négy kontaktus felragasztása nem ritkán művészet számba menő feladat. A kontaktusok esetleges gondatlan felhelyezése, vagy a kristályban levő apró repedések, a mért vezetőképesség abszolút értékét meghamisíthatják, a valódi értéktől több nagyságrenddel eltérőt adva, mint ez a TTF—TCNQ-n\* végzett első mérések esetén is történt. *Buravov* és *Segolev* módszerével egyetlen tűkristály vezetőképességének és dielektromos állandójának egyidejű mérése lehetséges *kontaktusok felragasztása nélkül*. Ma már általánosan elfogadott, hogy ezeken az anyagokon a vezetőképesség abszolút értékének egyedüli megbízható meghatározási módja a mikrohullámú vezetőképesség mérése.

b) a módszerrel az anyag komplex dielektromos állandója  $\varepsilon = \varepsilon' + i\varepsilon''$  mérhető, ahol  $\varepsilon'$  a dielektromos állandó, és  $\varepsilon''$   $\omega$  frekvencián a  $\sigma$  vezetőképességgel  $\varepsilon'' = \frac{4\pi\sigma}{\omega}$

alakban adható meg. A valós és képzetes rész pontos mérése egyszerre csak akkor lehetséges, ha körülbelül egyforma nagyságúak. Mivel az anyagok viszonylag jó vezetők, ez a feltétel csak elegendően magas frekvencián teljesül. Ugyanakkor a szükséges  $10^{-6}$ — $10^{-8}$ -as frekvencia felbontás elérése alacsonyabb frekvencián reménytelen. Ezért gyakorlatilag ez az egyetlen használható módszer az anyagok dielektromos állandójának mérésére.

c) a mikrohullámú és egyenáramú vezetőképességnek a hőmérséklet függvényében való egyezése, illetve egymástól való eltérése a vezetési mechanizmus megértéséhez szolgáltat új, értékes információt. Pl.: kiterjedt elektron állapotokon keresztül történő vezetés esetén a vezetőképesség frekvenciafüggetlenségét, még lokalizált állapotokon keresztül történő vezetés esetén erős frekvencia függést várunk.

A jelen dolgozat egyrészt, egy a *Buravov—Segolev* elven alapuló  $X$  sávban ( $10^{10}$  Hz-en) működő mikrohullámú ellenállás és dielektromos állandó mérő berendezés megépítéséről számol be, melyet *Jánossy András* és a szerző épített meg a KFKI Szilárdtest Kutató Intézetében, másrészt néhány kvázi egydimenziós szerves

\* A dolgozatban előforduló anyagok összetevőinek teljes neve, szerkezeti képlete és a név rövidítése az 1.1 és 1.2 ábrán található.



félvezetőn végzett mérés eredményeit mutatja be. A dolgozatban szereplő mérések abszolút hibája megegyezik az irodalomban leírt legjobb felbontású berendezésekkel végzett mérések hibájával. Pontosabb mérésekre ezekben az esetekben nem volt szükség. Más anyagokon, ahol a mérendő effektusok lényegesen kisebbek voltak ennél, közel egy nagyságrenddel jobb felbontást sikerült elérni. A jobb felbontás a a jeldetektálásnál alkalmazott újszerű megoldásoknak és gondosabban megépített mechanikának köszönhető.

Régóta elfogadott, hogy 1 d rendszerekben néhány 3 d-ben is meglévő effektus sokkal élesebben jelentkezik. Ilyen pl. az úgynevezett Kohn anomália és az azzal kapcsolatos jelenségek [3, 4] vagy a rendezetlenség elektron állapotokat lokalizáló hatása [5].

Vizsgált anyagainkban minden jel arra mutat, hogy csak az akceptor láncok vezetnek, s a körülöttük levő donor láncok a vezetésben aktívan nem vesznek részt. Ezeknek az egymáshoz gyengén csatolt kvázi egydimenziós vezető láncoknak vezetési mechanizmusát azok tökéletes periodicitása, illetve a periodikusságtól való kisebb-nagyobb eltérések, másszóval a transláció invariancia megléte vagy nem léte lényegesen befolyásolja. Az aperiodicitás az akceptor láncok elektron állapotait lokalizáltá teszi [5], mely a vezetőképeség jellegzetes frekvenciafüggését eredményezi [6]. Aperiodicitás hiányában a tulajdonságokat döntően más jellegzetes 1 d effektusok vagy a láncok közötti kölcsönhatások szabják meg, s a vezetés várhatóan többé-kevésbé kiterjedt állapotokon keresztül történik.

A transláció invariancia sérülésének leggyakoribb példája a láncokat megszakító szennyezések és más hibák léte. A vizsgálatra kerülő anyagokban még további három lényeges okot sorolhatunk fel:

1. Sok esetben a donor molekulák asszimmetrikusak. A kristályrácsban a donor láncon belül két ekvivalens orientációjuk lehetséges, melyek között az eloszlásuk véletlenszerű.

2. Az anyagok kikristályosításakor az oldószer molekuláknak a láncok közé való rendezetlen beépülése.

3. Az anyagot alkotó nagy szerves molekulák molekulán belüli rezgései, ha ezek frekvenciája sokkal kisebb az elektronok mozgására jellemző frekvenciánál. (Ez az elektronok mozgásának a molekuláris vibrációktól való adiabatikus szétválasztásának feltétele.)

Az első két pontban leírt sztatikus rendezetlenséggel szemben, melyeket a továbbiakban belső rendezetlenségnek nevezünk, a harmadik egy dinamikus effektus, mely minden anyagban jelen van.

A dolgozat 4 kvázi egydimenziós szerves són végzett mikrohullámú ellenállás és dielektromos állandó mérést és azok diszkusszióját tartalmazza. Az akceptor mindegyikben ugyanaz; tetracián-kinodimetán (a továbbiakban TCNQ, szerkezeti képlete az 1.1 ábrán látható). Ezek közül a kinolinum  $(\text{TCNQ})_2$  ( $\text{Qn}(\text{TCNQ})_2$ ) az utóbbi években egyik legtöbbet vizsgált [1, 7, 8, 9, 10, 11] TCNQ alapú só. Mérésünk ezen az anyagon az irodalmi adatokkal jól megegyezik. A dielektromos állandót az eddig ismertetett átfedő, de azt szélesebbre kiegészítő hőmérséklet-tartományon határoztuk meg. Ezt az anyagot széles körben az 1. pontban leírt belső rendezetlenséget tartalmazó anyagok egyik legjellegzetesebb példájának tartják. Megfigyelt viselkedése jórészt jól egyezik olyan elméletekkel, melyek a belső rendezetlenségnek tulajdonítanak alapvető szerepet [12, 13]. Az elméletektől kisebb, de lényegesnek látszó eltérés éppen a transzport tulajdonságokban tapasztalható. Ezek az eltérések



véleményünk szerint a rendezetlenség domináns szerepe mellett sem elhanyagolható egyéb kölcsönhatások következményei.

A további három anyagon végzett vizsgálatok célja éppen ezért a rendezetlenség és más kölcsönhatások szerepének lehetőség szerinti szétválasztása volt. Ehhez két olyan anyagot választottunk, melyekben a donor kémiai összetétele azonos, de az egyikben a donor molekula szimmetrikus, míg a másikban aszimmetrikus. A harmadik anyagba a kristályosítás során jelentős mennyiségű oldószer épült be, mely az anyag 120 °C fölé melegítése során eltávozik. A két fázis, valamint a szimmetrikus és aszimmetrikus donort tartalmazó anyagok tulajdonságainak összehasonlítása a belső rendezetlenség és más kölcsönhatások szerepére és azok összjátékára ad felvilágosítást. Ezeken az anyagokon tudomásunk szerint más még nem végzett mikrohullámú méréseket.

Az első fejezet a kvázi egydimenziós szerves sók néhány általános tulajdonságát sorolja fel, valamint néhány ezekre alkalmazott koncepciót foglal össze.

A második fejezetben kvalitatíve összefoglaltuk, hogy milyen információkat várunk a vezetés mechanizmusára a mikrohullámú mérésekből, és néhány mérést ismertettünk az irodalomból.

A harmadik fejezet a mikrohullámú mérés elvét és a megépített berendezés részletes leírását tartalmazza. Kitérünk azokra a megvalósított megoldásokra, amelyek a jobb felbontást lehetővé tették.

A negyedik fejezet a vizsgált anyagok leírását tartalmazza.

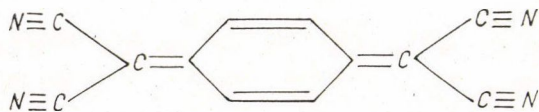
Az ötödik fejezetben foglaltuk össze mérési eredményeinket. A mikrohullámú vezetőképességet egyenáramú mérésekkel összehasonlítva adjuk meg (az egyenáramú mérések Mihály György munkái).

A hatodik fejezet tartalmazza a vezetési mechanizmusra és ezen keresztül a lényeges kölcsönhatásokra a mérésekből levonható következtetéseket.

A dolgozat végén összefoglaltuk az eredményeket és a főbb konklúziókat.

### 1. Kvázi-egydimenziós szerves sók jellemzése

Az anyagok, melyekről szó lesz, úgynevezett charge-transfer sók [1]; a donor molekulák elektronjaik egy részét átadják az akceptoroknak, és így egy többé-kevésbé ionos jellegű kristály keletkezik.\* Az 1.1 ábrán látható tetracián-kinodimetrián (TCNQ) planáris molekula, nagy elektron affinitású akceptor. Az 1.2 ábrán néhány donor molekula látható, melyeknek a TCNQ-val alkotott sóit legtöbbet vizsgálták. Az ábrán feltüntetjük a dolgozatban vizsgált sók donorjait is.

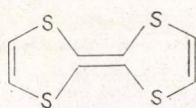


1.1 ábra. A tetracián-kinodimetán (TCNQ) szerkezeti képlete

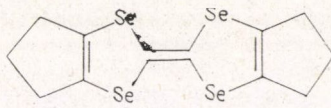
\* A magyar nyelvű szerves kémiai irodalomban ezeket az anyagokat molekula komplexeknek vagy komplex sóknak szokták nevezni. A komplex só elnevezés az angol irodalomban azonban ezek egy részcsoportjára terjedt el, a félreértések elkerülése érdekében használjuk az anyagokra az angol charge-transfer só nevet, melynek hasonló értelemben elterjedt magyar fordítása tudomásunk szerint nincs.



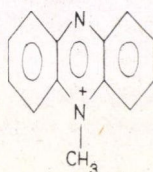
A TCNQ molekula elektron affinitása, a donorok ionizációs energiája és a keletkező ionos jellegű kristály Madelung energiája együttesen szabják meg a keletkező kristály szerkezetét, az akceptor és donor molekulák számának arányát és a töltés átvitel mértékét [14] (nem feltétlenül ad át minden donor egy teljes elektront). Az esetek jelen-



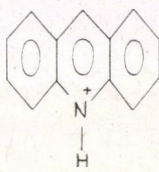
TTF  
tetratio – fulvalén



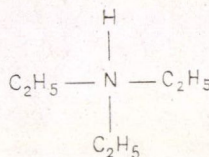
HMTSeF  
hexametil- tetraszelenó –  
fulvalén



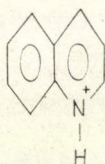
NMP  
N- metil- fenazinium



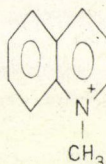
Ad  
Akridinium



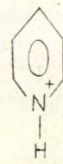
Et<sub>3</sub> NH  
trietyl- ammónium



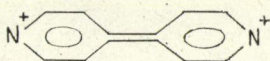
Qn  
kinolinium<sup>x</sup>



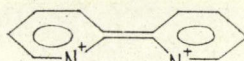
NMeQn  
N- metil- kinolinium<sup>x</sup>



Py  
Piridinium



4-4' BIP  
4-4' bipiridinium<sup>x</sup>



2-2' BIP  
2-2' bipiridinium<sup>x</sup>

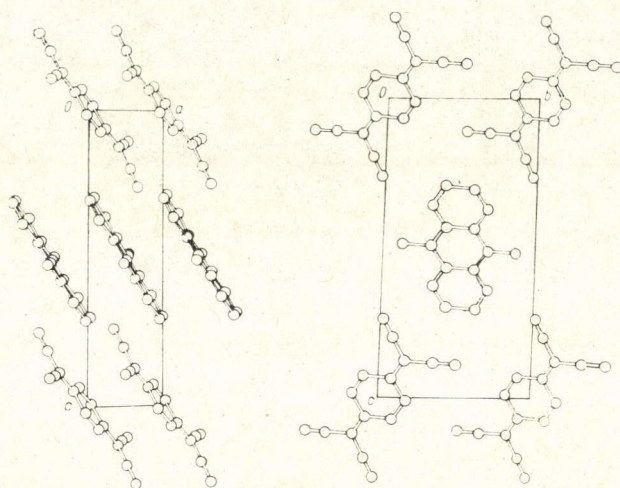
1.2 ábra. A dolgozatban előforduló TCNQ sók donorainak szerkezeti képlete, neve és rövidítése. x-el jelöltük az általunk vizsgált anyagok donorait.

tős részében a létrejövő kristályszerkezet olyan, hogy a TCNQ molekulák lapjukkal egymás felé fordulva, egymás fölött, oszlopokban helyezkednek el, hasonló donor molekula oszlopokkal körülvéve. Példaként NMP-TCNQ kristályszerkezete látható az 1.3 ábrán [1].

A láncszerű kristályszerkezet teszi indokoltá, hogy ezeket az anyagokat kvázi-egydimenziósoknak tekintsük. A TCNQ láncok mentén a szomszédos TCNQ mole-



kulák távolsága 3,2—3,6 Å között változik a különböző anyagokban, a molekulák síkjából kiemelkedő  $\pi$  pályák között jelentős átfedés van a láncok mentén. Ezen elektronok leírására gyakran a fémeknél és szervesetlen félvezetőknel megszokott sávmodellt alkalmazzák. A  $\pi$  pályákon mozgó elektronok összességéből létrejövő



1.3 ábra. Az NMP—TCNQ kristályszerkezete:  
láncok irányával párhuzamos és merőleges metszet [1]

sáv szélesség ma még vita tárgya, egyes esetekben — és egyes vélemények szerint — jelentős, néhány tized elektronvoltos sáv szélességet eredményezhetnek (pl. a TTF—TCNQ esetben [15]). Ugyanakkor a láncokra merőleges irányban a TCNQ molekulák egymástól, illetve a donor láncoktól lényegesen jobban szeparáltak, távolságuk egymástól 3—16 Å között változik, s elektrópályáik átfedése ebben az irányban nagyságrendekkel kisebb. A kristálynak, s az elektronszerkezetnek ez az igen erős anizotrópiája pl. a vezetőképesség anizotrópiájában tükröződik, melyet néhány anyagra az alábbi táblázatban mutatunk be:

anyag neve	$\sigma_{\perp}/\sigma_{\parallel}$	referencia
$\text{Cs}_2(\text{TCNQ})_3$	$2,5 \cdot 10^{-3}$	[1]
4—4' BIP(TCNQ) <sub>2</sub>	$3 \cdot 10^{-2}$	[48]
$\text{Et}_3\text{NH}(\text{TCNQ})_2$	$1 \cdot 10^{-2}$	[1]
NMP—TCNQ	$5 \cdot 10^{-3}$	[20]

Az erős anizotrópia indít arra, hogy ezeket a rendszereket egydimenziósoknak tekintsük, és a láncok közötti kölcsönhatást kis perturbációként kezeljük. Ez a kép néha nagyon jól beválik, de nem ritkán a helyzet bonyolultabb (pl.: fázisátalakulások felléptekor a láncok közötti csatolást nem lehet kis perturbációként kezelni, mert lényegében az irányítja a fázisátalakulást).

A különböző charge-transfer sók (melyeknek természetesen csak egy kis része TCNQ alapú) többféle szempont alapján oszthatók fel. Ezek közül négy szempontot mutatunk be, melyek mindegyike lényeges lehet egy adott anyag vizsgálatánál.



## a) A kémiai összetétel szerint [1]:

1. *egyszerű sóknak* nevezzük azokat, amelyekben az akceptor—donor arány 1:1. Madelung energia megfontolásokból ilyen esetekben várható, hogy a töltés átadás nem teljes [14]. Példaként említhetjük a TTF—TCNQ-t és az NMP—TCNQ-t. A kísérletek szerint valóban egyikben sem teljes a charge transfer, a TTF—TCNQ-ban 0,58, az NMP—TCNQ-ban 0,63 körüli érték az átlagos átadott töltés molekulánként [14].
2. A *komplex sókban* a donor akceptor arány az 1:1-től eltér. Ilyen pl. az általunk vizsgált összes anyag ( $\text{Qn}(\text{TCNQ})_2$  stb.). Ezekben az anyagokban várható, hogy a charge transfer teljes [14].

## b) A donor molekulák típusa szerint:

1. beszélünk zárt héjú donorokról, melyek legkülső páratlan elektronjukat az acceptornak átadva zárt héjú diamágneses molekulaként szerepelnek az anyagban. Ilyenek például az általunk vizsgált anyagok és az NMP.
2. Nyílt héjú donoroknak a töltés átadás előtt külső héjuk zárt és diamágnesesek, a töltés átadás után egy kompenzálatlan spinű elektron marad vissza a külső héjukon. Ilyenek a TTF, TTT és általában a kén és szelén tartalmú donor molekulák.

## c) Az 1.2 ábra példája szerint a donor molekulák két csoportra oszthatók [1, 16]:

1. Aszimmetrikusokra, mint pl. a  $\text{Qn}$ ,  $\text{Ad}$ , vagy a 2—2' BIP molekulák. Ezek a molekulák geometriailag szimmetrikusak, de N atomok aszimmetrikus elhelyezkedése miatt a töltés átadás után jelentős elektromos dipólusmomentumuk lesz. A kristályrácsban ezek a molekulák kétféleképpen helyezkedhetnek el. Ha a dipólusmomentumuk nem túl nagy, akkor általában rendezetlenül veszik fel a két állapot valamelyikét. Ez a rendezetlenség véletlenszerű aperiodikus potenciált jelent a TCNQ lánc mentén mozgó elektronok számára. Ezek az anyagok ezért „eleve rendezetlenek”, ami tulajdonságaikat döntően megszabja.
2. Szimmetrikusokra, mint pl. a TTF, TSeF, TTT, vagy 4—4' BIP molekulák. Ezek sói mentesek a fenti rendezetlenségtől.

## d) Vezetőképességeik szerint az anyagokat. Kepler [17] és Segolev [1] empirikusan 3 csoportba sorolta:

1. jól vezető anyagok: vezetőképességük szobahőmérsékleten nagyobb, mint  $10 \Omega^{-1} \text{cm}^{-1}$ . Pl.:  $\text{Qn}(\text{TCNQ})_2$ ;  $\text{Ad}(\text{TCNQ})_2$ ; NMP—TCNQ; TTF—TCNQ stb.
2. Közepesen vezető anyagok: vezetőképességük  $10^{-3}$  és  $10^0 \Omega^{-1} \text{cm}^{-1}$  között van. Pl.:  $\text{Cs}_2(\text{TCNQ})_3$ ;  $\text{Py}(\text{TCNQ})_2$ .
3. Rosszul vezető anyagok: vezetőképességük kisebb, mint  $10^{-3} \Omega^{-1} \text{cm}^{-1}$ . Pl.:  $\text{Et}_3\text{NH TCNQ}_2$  stb.

Az ez ideig ismert legjobban vezető szerves anyagok a TTF—TCNQ családba tartoznak [15, 18, 19]. Szobahőmérsékleti vezetőképességük  $300\text{—}1000 \Omega^{-1} \text{cm}^{-1}$



között változik, ez átlag 20-as faktorról nő 60 K-ig, ahol fém—félvezető fázisátalakulás játszódik le, kivéve a HMTSeF—TCNQ-t, mely jól vezető marad egészen 7 mK°-ig [19].

A dolgozat tárgyát képező anyagsalád továbbá az NMP—TCNQ[20], az Ad(TCNQ)<sub>2</sub> [1, 21] és ezek több származéka alkotja a jól vezető anyagok egy másik népes csoportját. Ezek tulajdonságainak kialakításában — széles körben elfogadott nézet szerint — a fenti értelemben aszimmetrikus donor molekulák rendezetlen irányítottságából származó rendezetlenség játszik alapvető szerepet. A továbbiakban ezek vezetési tulajdonságairól még bőven lesz szó.

A közepesen vezető sók általában félvezető viselkedést mutatnak [1], vezető-képességük hőmérséklet-függése határozott exponenciális viselkedést mutat néhány tized elektronvoltos aktiválási energiával.

A harmadik csoportba tartozó rosszul vezető anyagok gyakorlatilag szigetelők [1].

### 1.1 Kvázi egydimenziós fémek instabilitásai

Peierls [3] hívta fel először a figyelmet arra, hogy egy 1 d fémcs lánc instabil az elemi cella sokszorozódására nézve: ha az eredetileg azonos távolságban levő molekulákból álló lánc úgy deformálódik, hogy az új elemi cella éppen  $\pi/2k_F$ , akkor az új Brillouin zóna határon (a Fermi felületnél) nyíló energia gap az elektronrendszer összenergiáját csökkenti. Ez az energianyereség fedezi a lánc deformálásához szükséges energiát, s az alapállapot szigetelő, s nem fém. A hőmérsékletet növelve egyre több elektron gerjesztődik a gap fölé, így a fenti energianyereség csökken, és egy kritikus hőmérséklet felett a lánc deformációja megszűnik. Ezt a fázisátalakulást nevezzük Peierls átalakulásnak.

Gyenge elektron—elektron kölcsönhatás esetén 1 d fémcs állapot nem csak a rács deformációjára és töltéshullámok kialakulására, hanem spinhullámok vagy Cooper párok keletkezésére nézve is lehet instabil [22]. Az instabilitások közös oka (a Peierls instabilitásé is), az, hogy 1 d-ban a Fermi-felület csak 2 pont, az elektronok  $2k_F$ -fel való szóródása zérus energiát igényel, ez a rendszer korrelációs függvényeiben egy logaritmikus szingularitásra vezet (Kohn anomália). Az alapállapot 3 féle lehet: szupravezető, antiferromágneses vagy Peierls-típusú, attól függően, hogy melyik korrelációs függvény divergál gyorsabban. A probléma a Gell—Mann-Low renormálási csoport segítségével tárgyalható [4].

Ugyanezzel a renormálási csoport módszerrel vizsgálható gyengén kölcsönható fémcs láncok rendszere is. A láncok közötti csatolás korrelált töltéshullámok megjelenését eredményezheti a láncok mentén véges hőmérsékleten [23].

### 1.2 Korrelációs effektusok

Az előző pontban leírtakkal szemben a vizsgált anyagok szempontjából realisztikusabb eset az, amikor az elektron—elektron kölcsönhatás (sokkal) nagyobb, mint a sáv szélesség. Ilyenkor szokás a Hubbard [24] által bevezetett modellt használni, mely az elektronsávot erősen kötött elektron közelítésben tartalmazza, az elektron—elektron kölcsönhatásból pedig csak a legnagyobb tagot, az azonos helyen levő elektronok közötti taszítást veszi figyelembe

$$H = \sum_{i,\sigma} t(a_{i,\sigma}^+ a_{i+1,\sigma} + a_{i+1,\sigma}^+ a_{i,\sigma}) + U_0 \sum_i n_{i,\uparrow} n_{i,\downarrow} \quad 1.1.$$



Ha az  $U_0$  kölcsönhatás nagy, akkor hatására a sáv felhasad két sávra, úgy, hogy mindkét sávban az állapotok csak egyszeresen lesznek betölthetők. Félig töltött sáv esetén ez azt jelenti, hogy a rendszer szigetelő lesz, de nem  $\pi/2a$ -nál nyílik gap a diszperziós relációban, mint a Peierls instabilitás esetén, hanem a Fermi-felület kitolódik  $\pi/a$ -ra a zóna falához. Az  $U_0 \rightarrow \infty$  határesetben a modell egy spin nélküli Fermi-rendszert ír le [25, 26]. Ha a sáv eredetileg félig volt töltve, akkor a rendszer szigetelő lesz, de tetszőleges más betöltés esetén fém. Ez a furcsaság annak a következménye, hogy a hosszú hatótávolságú Coulomb kölcsönhatást a modell egy kontakt kölcsönhatással helyettesíti. Ezzel a korrelációk jelentős részét figyelembe veszi félig töltött sávra, de nem a lényeges részt veszi figyelembe más betöltéseknél. Ezen úgy lehet segíteni, hogy pl.  $1/4$ -ig töltött sáv esetén az

$$U_1 \sum_{i,\sigma} n_{i,\sigma} n_{i+1,\sigma}$$

tagot is figyelembe veszünk, ami a rendszer alapállapota számára most lényeges [26]. Ez a tag most ugyanúgy mint az előbb, egy  $U_1$  nagyságrendű gap-et nyit (pontosabban ismét a zónahatárra tolja a Fermi-felületet az  $U_0 > U_1 \gg t$  limitben). Persze ennek értelmé kétséges, mert az 1.1 Hamilton-operátor önmagában is nehezen kezelhető.

A modell általánosítható a láncok közötti kölcsönhatás figyelembevételére [27] is, ez átlag tér közelítésben megoldható, és ugyanúgy, mint az előző gyenge csatlósú esetben fázisátalakulásra vezet, ahol a  $T_c$  alatt az elektronok rendezetten helyezkednek el a láncokon. Ha 1-essel jelöljük az elektronokat és 0-val az üres helyeket, akkor negyedik töltött sáv esetén az alapállapotban a ...101010... elrendezésű lánc ...010101 konfigurációkkal lesz körülvéve.

Mind a láncon belüli, mind a láncok közötti korrelációk figyelembevétele az eredeti csupasz sávészleltség ( $4t$ ) nagymértékű csökkenését eredményezi [24].

### 1.3 Rendezetlenség kvázi 1 d rendszerekben

Az előzőekben leírt jelenségek létrejöttét erősen befolyásolhatja vagy meg is akadályozhatja a transláció invariancia — bevezetőben is említett — sérülése. Ez a vizsgált anyagokban a megszokottól eltérő módon is létrejöhet.

Megszokott alatt a teljes periodicitástól szennyezések és rácshibák által okozott eltéréseket értjük. Ezen kívül a vizsgált anyagokban lényeges szerepet játszhat azok „belső” és „dinamikus” rendezetlensége.

Belső rendezetlenségnek nevezzük az aszimmetrikus donor molekuláknak a donor láncokon belüli véletlenszerű orientációjából származó rendezetlenséget [16], vagy a kristályba a láncok közé rendezetlenül beépülő oldószer molekulák hatását [28].

Dinamikus rendezetlenség alatt egy speciális elektron—fonon kölcsönhatást értünk. Ha a kristályrácsot alkotó nagy molekulák intramolekuláris vibrációinak frekvenciája  $\omega_f$  sokkal kisebb, mint a láncok mentén mozgó elektronok karakterisztikus hopping frekvenciája  $\omega_e$  ( $\omega_e/\omega_f \gg 1$ ), akkor a kettő adiabatikusan szétválasztható [9, 29]. Az elektronrendszert úgy tekinthetjük, mintha az elektronok az intramolekuláris vibrációk által okozott időben lassan változó aperiodikus potenciálban mozognának.

Valamennyi említett transláció invarianciát sértő effektus hatása — bár különböző körülmények között jutnak érvényre —, lényegében ugyanolyan jellegű. Bár



ezek nem mindegyike volt részletes elméleti megfontolások tárgya, közös jellemzőjük, hogy az egyes rácshelyeken az elektronok molekulapályáinak energiáját véletlenszerűen perturbálják. A probléma, ha csak két lehetséges energiaszintet engedünk meg ekvivalens egy két komponensű 1 d ötvözet problémájával.

Mott és Twose [5] egy 1 d rendezetlen Kronig—Penney-modellre bizonyította be először, hogy a Schrödinger-egyenlet minden sajátfüggvénye exponenciálisan lecseng. A lecsengés gyorsaságát a véletlen potenciál erőssége és a perturbált helyek átlagos sűrűsége szabja meg.

A probléma Hamilton-operátora erősen kötött elektron közelítésben

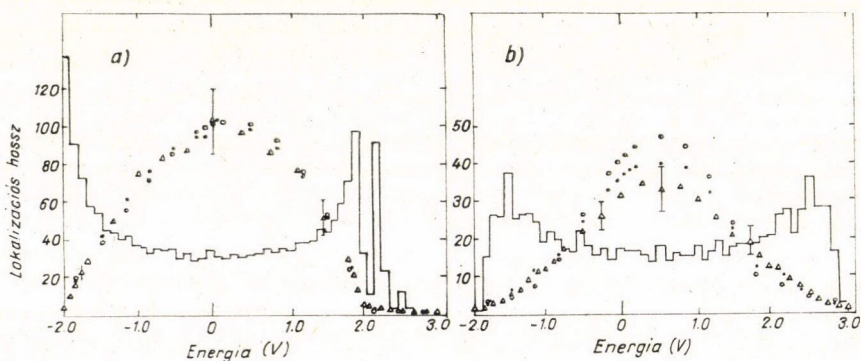
$$H = \sum_{i,\sigma} \varepsilon_i a_{i,\sigma}^+ a_{i,\sigma} + \sum_{i,j,\sigma} t_{ij} (a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma} + a_{j\sigma}^+ a_{i\sigma}). \quad (1.2)$$

Ez a Hamilton-operátor kétféle rendezetlenséget képes leírni.  $\varepsilon_i$ -t minden  $i$ -re azonosnak választva  $t_{ij}$ -t véletlen változónak tartva kapjuk a rendezetlenség egyik típusát (nem diagonális rendezetlenség), ami az amorf anyagokra jellemző.  $t_{ij}$ -t lerögzítve  $\varepsilon_i$ -t tartva véletlen változónak kapjuk a rendezetlenség számunkra is érdekes típusát (diagonális rendezetlenség).

Numerikus számolások ismereteseek [30, 31, 32], melyek megadják a lokalizációs hossz  $L$ -t (a hullámfüggvényt  $\propto \exp(-x/L)$ -el közelítve) és az állapotok sűrűségét mint az energia függvényét. Az eredményekre az 1.4 ábra mutat példát [31]: az 1.2 Hamilton-operátorban  $\varepsilon_i = 0$  vagy  $\delta$ ,  $x$ , ill.  $1-x$  valószínűséggel  $t_{i,i+1} = t_{i,i-1} = V$  egyébként 0.

A rendezetlen potenciál nagyságának ( $\delta$ ) és átlagos sűrűségének növelésével az eredeti sávból egyre több állapot csuog ki a tiltott sávba, és az állapotok egyre erősebben lokalizáltak lesznek.

1 d félvezető esetén (függetlenül attól, hogy a tiltott sávot (gapet) milyen mechanizmus hozta létre), tehát a rendezetlenség hatása az, hogy erősen lokalizált állapotok jelennek meg a gapben, míg a gaptól távol az állapotok kevésbé lokalizáltak.



1.4 ábra. Numerikus számítások eredményei kétkomponensű egydimenziós lánc elektronszerkezetére.

A folytonos vonal az állapotsűrűség tetszőleges egységeiben, a  $V$  egységeiben mért energia függvényében (a sáv szélesség mindkét komponensre  $4V$ ). A különböző pontok a különböző módszerrel számított lokalizációs hossz jelzik rácscellák egységeiben.

Az a) ábrán a koncentráció  $x=0,1$ ; a b) ábrán  $x=0,5$  a kétféle atomi pálya energia különbsége  $\delta = V$  mindkét esetben (ábrák a [31] hivatkozásból)



Minden olyan esetben, ahol a gap nyílásából és a betöltött állapotok lejjebb kerüléséből származó energianyereség fedezi a gap kialakításához szükséges energiát (pl.: Peierls-instabilitás) ez az energianyereség erősen csökken, vagy teljesen hiányzik rendezetlenség jelenlétében, ami megakadályozza a rendezett (pl. töltéssűrűség hullám, Peierls) állapot kialakulását [16].

## 2. Vezetőképesség és dielektromos állandó

### 2.1 Transzporttulajdonságok $\omega$ függése, dielektromos állandó

Az általunk vizsgált anyagok alapállapota szigetelő, növelve a hőmérsékletet vezetőképességük félvezető jellegű növekedést mutat. Az ilyen jellegű viselkedést különböző mikroszkopikus modellekkel lehet megmagyarázni, ezek azonban a tulajdonságok részleteiben, a vezetőképesség hőmérséklet-függésének részleteiben, frekvenciafüggésében vagy a dielektromos tényező nagyságában és hőmérséklet-függésében más és más eredményre vezetnek. Ezek a modellek durván 2 csoportra oszthatók, aszerint, hogy kiterjedt vagy lokalizált állapotok járulnak hozzá a vezetéshez.

a) Ha a vezetés kiterjedt állapotokon keresztül történik, frekvenciafüggetlen vezetőképességet várunk.

Az 1 d instabilitások a megszokott félvezető sávszerkezet kialakulását eredményezhetik. Ebben az esetben a vezetőképességben éles gap fellépését várjuk, és nulla hőmérsékleten a dielektromos állandó a szokásos

$$\epsilon' = 1 + \frac{2}{3} \left( \frac{\hbar \omega_p}{\Delta} \right)^2 \quad (2.1)$$

alakú [33, 34], ahol  $\omega_p$  a plazma frekvencia,  $\Delta$  a gap. A  $2/3$ -os faktor a speciális 1 d struktúra következménye.  $\omega_p$  erősen kötött elektron közelítésben kifejezhető a transfer integrállal

$$(\hbar \omega_p)^2 = 16Ne^2 a^2 t.$$

Ebben a modellben  $\epsilon'$ -t lényegében hőmérséklet-függetlennek várjuk, a hőmérséklet-függést hordozó additív járulék  $\exp(-\Delta/2kT)$ -vel arányos (minden esetben  $\Delta/2 \gg \gg 300$  K).

Természetesen ennek a modellnek az alkalmazhatóságát várjuk, ha a kristályszerkezet eleve olyan, hogy a Fermi-felület a Brillouin-zóna határára esik. Ahhoz, hogy ezt véges hőmérsékleten az 1 d instabilitások okozzák, ahhoz a 3 d csatolásnak is szerepet kell játszania (1 d-ben véges hőmérsékleten nem lehet hosszú távú rend), mely véges hőmérsékleten a rendezett fázis, s a gap eltűnését eredményezheti. A lejátszódó félvezető — fém fázisátalakulás egy (elvben éles) maximumot eredményez a vezetőképességben (a fémes fázisban a fonon szórás miatt a vezetőképesség csökken). A megfigyelt lapos maximum magyarázható azzal, hogy a rendezetlenség elmosza az éles fázisátalakulást.

Egy másik lehetőség az, hogy erős elektron—elektron korrelációk miatt alapállapotban az elektronok lokalizáltak, de a korrelációs gap felett delokalizált elektronállapotok helyezkednek el. Mivel a vezetésért itt is ezek a delokalizált állapotok a felelősek, a vezetőképesség frekvenciafüggetlen,  $\epsilon'$ -t nagyságrendben (2.1) jól kell



adja. Fázisátalakulás itt is lehetséges: a gerjesztett delokalizált elektronok leáryékolják a Coulomb kölcsönhatást, mely a gap csökkenését és esetleges eltűnését eredményezi [35, 36] (Mott-átalakulás).

b) Ha az elektron állapotok lokalizáltak  $T \rightarrow 0$ -ra  $\sigma \rightarrow 0$ -t kapunk, akkor is, ha az állapotsűrűség a Fermi felületnél véges. A vezetés véges hőmérsékleten az elektronok lokalizált állapotok közötti fonon indukált ugrásával (hopping) történik [6, 12]. Ez a típusú vezetés egyes amorf félvezető anyagokban fordul elő. A vezetőképességre az elmélet 3 d-ban

$$\sigma = \sigma_0 e^{-\left(\frac{T_0}{T}\right)^{1/4}}$$

viselkedést jósol. Az elmélet 1 d megfelelőjét Gogolin, Melnikov és Rashba [12] dolgozta ki részletesen, mely

$$\sigma = \sigma_0 e^{-\left(\frac{T_0}{T}\right)^{1/2}}$$

ad alacsony hőmérsékleten. A fononok hatására bekövetkező hopping a lokalizációs hossz effektív növekedéseként lép fel a vezetőképesség növekedését eredményezve. Magas hőmérsékleten a molekulán belüli rezgések gerjesztődésével az általuk okozott dinamikus rendezetlenség hatására a lokalizációs hossz, s így a vezetőképesség is ismét csökkenni kezd. Mindez a vezetőképesség hőmérséklet-függésében egy elktent maximumot okoz.

Mind a 3 d mind az 1 d elmélet  $\sigma$  erős frekvencia függését, egy  $\omega^2$ -el arányos tag létezését jósolja. Az elmélet ebben a vonatkozásban nincs kvantitatíve kidolgozva.

Dielektromos állandóra alacsony hőmérsékleten viszonylag nagy ( $\sim 10^3$ ) értéket kapunk [9, 12], mely a hőmérséklet növelésével lassan csökken.

Erősen lokalizált elektron határesetben a dielektromos állandóra Van Vleck elmélete irányadó [1]. Feltételezve, hogy az elektronrendszer alapállapota  $\psi_0$  és gerjesztett állapota  $\psi_1$  között  $W$  energia különbség van, ( $W$  nem feltétlenül azonos a vezetőképesség hőmérséklet-függéséből meghatározott gappel, sokkal inkább a termoelektromotoros erőmérésekből meghatározottal [1].) zérus hőmérsékleten

$$\epsilon' = 1 + \frac{4\pi}{W} 2n |p_{10}|^2 \quad (2.2)$$

ahol  $p_{10}$  a dipólmomentum mátrix eleme  $\psi_1$  és  $\psi_0$  között. A (2.2) formula durván egyezésbe hozható a megfigyelt  $\epsilon'$ -el hihető paraméter értékek mellett. Véges hőmérsékleten a gerjesztett állapotok  $p_{11}$  dipólmomentumából egy (a szinglet-triplet gerjesztések szuszceptibilására hasonló) nulláról exponenciálisan felnövekvő, majd  $1/T$ -vel csökkenő additív tag jelenik meg. Ugyanakkor a vezetőképesség megfigyelt diszperziójának, a nagyobb mikrohullámú vezetésnek az oka is ez a polarizációs mechanizmus.

A valóságban valószínűleg mind lokalizált, mind kvázilokalizált állapotok szerepet játszanak. Hasonlóan az amorf félvezetőkhez [6] van egy elmosódott gap, és vezetéshez az egyes esetekben más és más mértékben, de járulékot ad mind a

1. hopping  $\epsilon_F$  körüli lokalizált állapotok között (aktiválási energia igen kicsi),
2. hopping gerjesztett lokalizált állapotok között (változó aktiválási energia),
3. gerjesztett (kvázi) kiterjedt állapotok vezetése (határozott aktiválási energia).



Ha 1 és 3 hatása domináns, akkor általában két határozott aktiválási energia különül el a hőmérséklet függvényében egy többé-kevésbé éles mobilitás gapet jelezve [6]. Bár az  $\omega$  függés részletes elmélete nem ismeretes, éles kvalitatív különbség adódik lokalizált és kiterjedt elektronállapotokon keresztüli transzport esetén. Az első esetben erős frekvenciafüggés, a másodikban frekvenciafüggetlenség várható. Így tehát a mikrohullámú mérésektől (illetve ezeknek az egyenáramú mérésekkel való összevetésétől) várjuk elsősorban az elektronállapotok rendezetlenség hatására bekövetkező lokalizáltságának bizonyítékait.

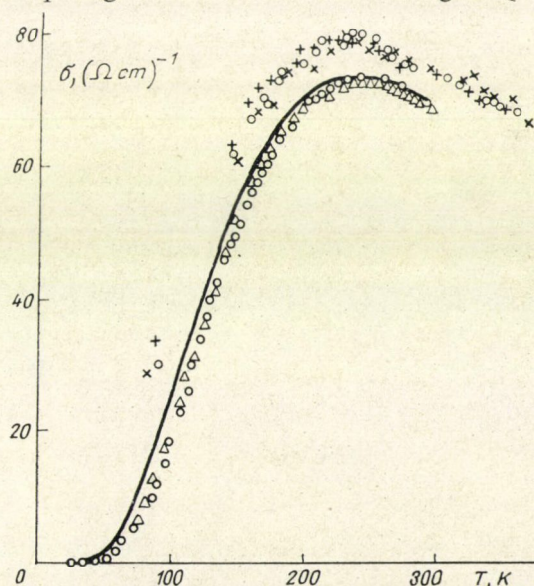
## 2.2 Irodalmi adatok összefoglalása

A mikrohullámú mérések fontosságát és a belőlük nyert információ hasznosságát bizonyítja, hogy több csoport végez ilyen vizsgálatokat.

A vizsgálatok célja általában egyes anyagokra vonatkozó elképzelések igazolása volt.

A TTF—TCNQ esetében az elsődleges cél a vezetőképesség abszolút értékének megbízható meghatározása volt [34, 37, 38]. A mikrohullámú vezetőképesség az egész hőmérséklet-tartományban követi az egyenáramú mérést, mutatva a kiterjedt elektronállapotok domináns szerepét. A mért dielektromos állandó alacsony hőmérsékleten  $\epsilon' \cong 4000$ , gyengén növekszik, csak kb. 40 K-ig volt mérhető (indoklást lásd a következő fejezetben). A mért plazma frekvencia  $\omega_p = 1,2$  eV volt, míg a gap  $\Delta = 0,015$  eV. (2.1)-be helyettesítve ez jól tükrözi a mért  $\epsilon'$  értéket.

A 2.1 ábra mutatja Zolotukhin, Segolev és munkatársainak mikrohullámú és egyenáramú vezetőképesség-mérését az általunk is vizsgált  $\text{Qn}(\text{TCNQ})_2$ -n [9]. Jól



2.1 ábra. A  $\text{Qn}(\text{TCNQ})_2$  dc ( $\Delta; 0$ ) és mikrohullámú ( $\circ; +; \times$ ) vezetőképessége, a folytonos vonal a Gogolin, Melnikov, Rashba- [12] elmélettel való fit.

(ábra a [9] referenciából)

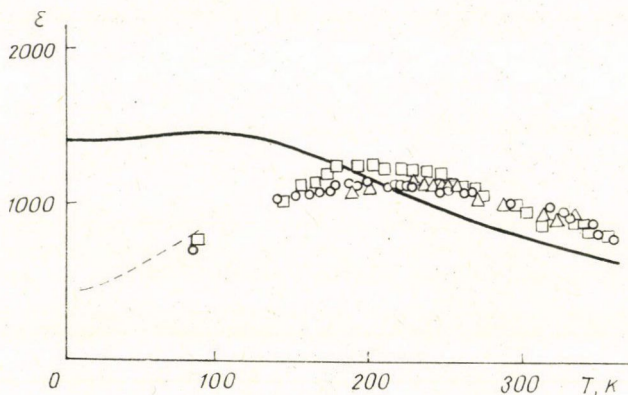


látszik, hogy nitrogén hőmérsékletnél már a két vezetőképesség között egy 3-as faktor különbség van. (Mint látni fogjuk alacsonyabb hőmérsékleten ez tovább nő.) A kihúzott vonal a Gogolin, Melnikov, Rashba [9, 12]- elmélettel illesztett görbe. A látszólag jó egyezésnek két szépséghibája van. Az egyik az, hogy a meghatározott véletlenszerű potenciál nagysága  $W \cong 550$  K körül van, és ennek az elmélet kis paraméterének kellene lenni ( $W \ll kT$  fel volt téve a számolás során). A második probléma az, hogy a jó egyezés a választott lineáris skálának is köszönhető, a megfigyelt vezetőképesség alacsony hőmérsékleten lényegesen eltér a

$$\sigma \sim \exp \left[ - \left( \frac{T_0}{T} \right)^{1/2} \right]$$

viselkedéstől. Maguk a szerzők sem remélnék kvalitatív egyezésnél többet. Sajnos a dielektromos tényező hőmérséklet-függésére, még ezt sem sikerült elérni.

A 2.2 ábrára szaggatott vonallal saját alacsony hőmérsékleti méréseinket is be-  
rajzoltuk, az elmélet a jellegzetes alacsony hőmérsékleti csökkenést nem tükrözi.



2.2 ábra. A  $\text{Qn}(\text{TCNQ})_2$  dielektromos állandójának a Gogolin, Melnikov, Rashba-elmélettel való összehasonlítása (folytonos vonal) a [9] referenciából. A szaggatott vonallal saját méréseink eredményét tüntettük fel

Hogy az eredmények értékelése mennyire nem egységes, arra példa az is, hogy Heeger és munkatársai a  $\text{Qn}(\text{TCNQ})_2$  családhoz sok szempontból hasonló NMP—TCNQ tulajdonságait egész más módon értelmezték [20]. A nagyon hasonló viselkedést egy elmosódott Mott átmenetként magyarázták, a frekvenciafüggést és az egyenáramú vezetőképesség  $\lg \sigma - 1/T$  skálán való alacsony hőmérsékleti görbülését szennyezések hatásának tulajdonítva.

A további mikrohullámú vizsgálat célja annak megállapítása, hogy az egyes anyagokban milyen jellegű a transzport, és ezen keresztül, hogy milyen kölcsönhatások játszanak lényeges szerepet a kvázi 1 d rendszerekben.



### 3. Mikrohullámú ellenállás és dielektromos állandó mérő

#### 3.1 A mérés elve

Jánossy András és a szerző által a KFKI-ban épített mikrohullámú ellenállás és dielektromos tényező mérő berendezés elvét először *L. I. Buravov* és *I. F. Segolev* írta le. Ez a speciális technika főleg igen vékony, tű alakú anyagminták vizsgálatára alkalmas. A mérés egy nagy jósági tényezőjű üregrezonátor jósági tényezőjének és frekvenciájának változásából áll, az anyagminta bevitelének hatására. A minta geometriai jellemzőinek meghatározása után a jósági tényező és rezonancia frekvencia változásából a vezetőképesség és a dielektromos tényező megkapható.

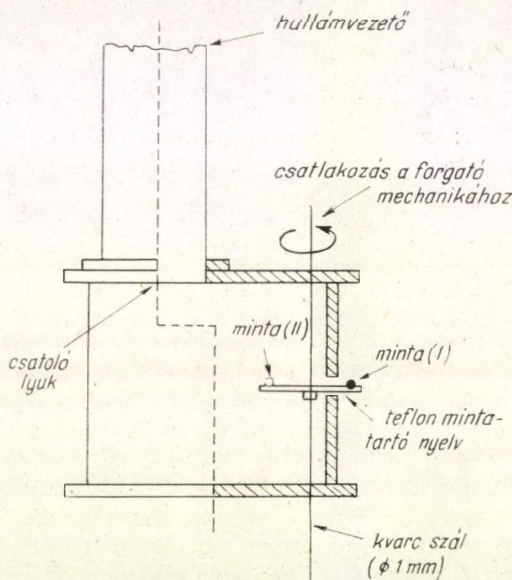
A mérőfej (3.1 ábra) egy transzverzális elektromos  $011$  ( $TE_{011}$ ) módusban működő  $\sim 9 \cdot 10^9$  Hz rezonancia frekvenciájú henger alakú, nagy jósági tényezőjű üregrezonátor. Az üreg falán levő rés, a belsejében végigmenő vékony ( $0,8\text{--}1$  mm átmérőjű) kvarc szál és a rajta levő teflon mintatartó a 3.1 ábra szerinti elrendezésben lehetővé teszi, hogy a mintatartó egyik oldalára elhelyezett mintát az üregből ki és be lehessen forgatni az üregen kívül levő mechanikus áttételekkel. A mintatartó és a rajta levő minta elhelyezése olyan, hogy a tű alakú néhány mm hosszú minta beforgatott állapotban az elektromos térrel párhuzamosan áll az üreg maximális térerősségű helyén.

Ha az üres mintatartó két oldala teljesen szimmetrikus, az egyik oldalára helyezett minta beforgatása megváltoztatja az üreg rezonancia frekvenciáját és jósági tényezőjét. Mivel a minta térfogata az egész üregéhez képest kicsi, ezért nem változtatja meg a rezonáló módust csak kis perturbációt okoz, amely a kitöltési tényezővel arányos:

$$\alpha = \frac{1}{2} \frac{\int_{V_m} |\mathbf{E}(\mathbf{r})|^2 dV}{\int_{V_u} |\mathbf{E}(\mathbf{r})|^2 dV},$$

ahol a számlálóban levő integrál a minta  $V_m$  térfogatára a nevezőben levő az üreg  $V_u$  térfogatára végzendő el. Mivel a minta helyén  $\mathbf{E}_0$  állandónak vehető az egész üregben pedig  $\mathbf{E}_0(\mathbf{r})$  ismert,  $\alpha$  kiszámítható,  $TE_{011}$  módusra

$$\alpha = 2,1 \frac{V_m}{V_u}.$$



3.1 ábra. A mérőüreg sematikus rajza. I és II jelzi a minta két lehetséges helyzetét



Ha a minta vastagsága ( $d$ ) kisebb, mint a szkin mélység ( $\lambda$ ), kvázi sztatikus közelítésben (hullámhossz  $\gg$  mint a minta hossza) az elektromos tér a minta belsejében

$$\mathbf{E} = \frac{\mathbf{E}_0}{1 + n(\varepsilon' - 1)},$$

ahol  $n$  a minta depolarizációs faktora,  $\varepsilon$  a komplex dielektromos tényező. ( $\varepsilon = \varepsilon' + i\varepsilon''$ ,  $\varepsilon'$  a dielektromos tényező,  $\varepsilon'' = \frac{4\pi\sigma}{\omega}$ , ahol  $\sigma$  a vezetőképesség.)

A mérhető mennyiségek a rezonancia frekvencia eltolódása ( $\delta = \frac{\omega_{\bar{u}} - \omega_m}{\omega_{\bar{u}}}$ ) és rezonancia félérték szélességének megváltozása ( $\Delta/2 = \frac{1}{2} \left( \frac{1}{Q_{\bar{u}}} - \frac{1}{Q_m} \right)$ ) a minta hatására. Tipikus üreg rezonancia görbéket mintával és minta nélkül mutat a 3.2 ábra: az  $X$  tengely arányos a frekvenciával az  $Y$  a visszavert teljesítménnyel. A mért paraméterek kifejezhetők a minta fizikai és geometriai paramétereivel [2].

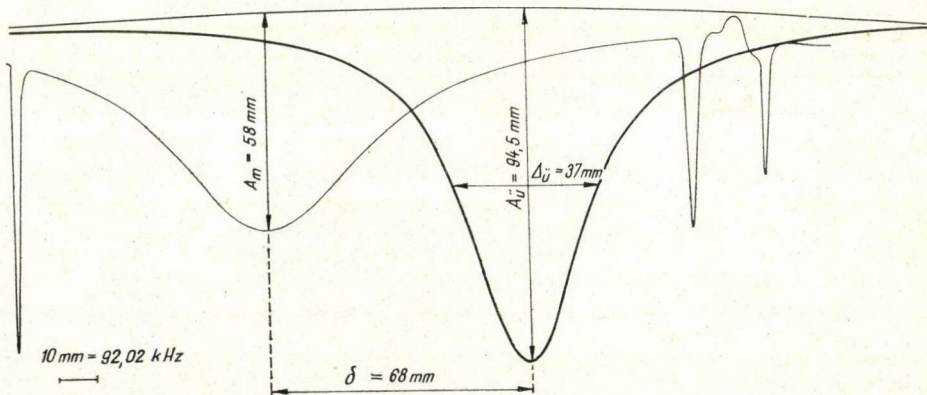
$$\delta = \frac{\alpha\{(\varepsilon' - 1)[1 + n(\varepsilon' - 1)] + n\varepsilon''\}}{[1 + n(\varepsilon' - 1)]^2 + (n\varepsilon'')^2} \quad (3.1a)$$

$$\frac{1}{2} \Delta = \frac{\alpha\varepsilon''}{[1 + n(\varepsilon' - 1)]^2 + (n\varepsilon'')^2}. \quad (3.1b)$$

Ezeket invertálva kapjuk

$$\varepsilon' - 1 = \frac{1}{n} \frac{\delta \left( \frac{\alpha}{n} - \delta \right) - \left( \frac{\Delta}{2} \right)^2}{\left( \frac{\alpha}{n} - \delta \right)^2 + \left( \frac{\Delta}{2} \right)^2} \quad (3.2a)$$

$$\varepsilon'' = \frac{\alpha}{n^2} \frac{\Delta/2}{\left( \frac{\alpha}{n} - \delta \right)^2 + \left( \frac{\Delta}{2} \right)^2}. \quad (3.2b)$$



3.2 ábra. Tipikus regisztrátum



A minta méretének ismeretében  $\alpha$  értéke kiszámítható,  $n$  értéke azonban csak közelítőleg adható meg feltételezve, hogy a minta ellipszoid alakú

$$n = \frac{3}{2} \frac{ab}{l^2} \left[ \ln \frac{8l}{a+b} - \frac{7}{3} \right], \quad (3.2)$$

ahol  $a$ ,  $b$  és  $l$  az ellipszoid főtengelyeinek hossza. Mivel  $n$  értéke így sokkal pontatlanabb, mint (3.1)-ben szereplő többi mennyiségé, ezért fontos megemlíteni két határesetet, melyek közül az egyikben  $n$  értéke kísérletileg meghatározható, a másikban pedig kiesik a formulából.

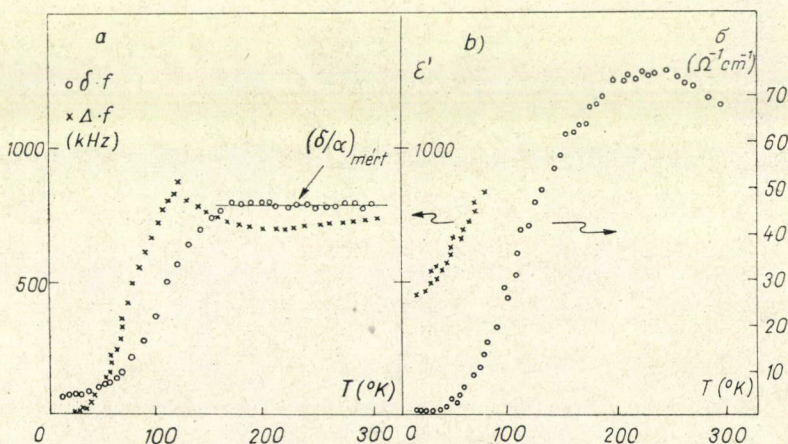
a) Jól vezető határesetben:  $\varepsilon'' \gg \varepsilon'$ ;  $1/n \gg 1$  esetén (3.1a) a következő alakban írható:

$$\delta = \frac{\alpha}{n} \frac{\varepsilon''^2 + o(\varepsilon'; 1/n)}{\varepsilon''^2 + o(\varepsilon'; 1/n)} \cong \frac{\alpha}{n}. \quad (3.3)$$

Ebben az esetben tehát a mért rezonanciafrekvencia eltolódás független az anyag tulajdonságaitól, teljesen annak geometriája határozza meg. Ilyen körülmények között  $\varepsilon'$ -t nem tudjuk megmondani, és  $\varepsilon''$  az

$$\varepsilon'' = \frac{\alpha}{n^2} \frac{2}{\Delta} \quad (3.4)$$

egyszerűbb alakot ölti. Mivel  $\alpha$ -t viszonylag pontosan tudjuk, ezért (3.3) segítségével  $n$ -t megmérhetjük abban a hőmérsékleti tartományban, ahol az anyag jól vezet, és ezt a kísérletileg meghatározott  $n$  értéket használhatjuk azokban a hőmérsékleti tartományokban, ahol ennek a határesetnek a feltételei már nem teljesülnek. Itt (3.2a) és (3.2b) adja meg  $\varepsilon'$ -t és  $\varepsilon''$ -t is. A 3.3 ábra egy tipikus példát mutat, a  $\text{Qn}(\text{TCNQ})_2$  példáját. A 3.3/a ábrán látható a mért  $\delta$  és  $\Delta$  a hőmérséklet függ-



3.3 ábra. Mérés a  $\text{Qn}(\text{TCNQ})_2$ -n

a) a rezonancia eltolódás (o) és a félértékszélesség változás (x) kHz-ben a hőmérséklet függvényében.

b) A számított  $\delta$  és  $\epsilon'$  hőmérséklet függése



vényében, 200 K fölött  $\delta$  konstans, innen  $n$  meghatározható, 3.3/b ábra mutatja a számolt  $\sigma$ -t és  $\varepsilon'$ -t a hőmérséklet függvényében.

b) Rosszul vezető határeset:  $1/n \gg \varepsilon'$ ;  $\varepsilon'' \cong 1$ . Ebben az esetben (3.1a) és (3.1b) a következő alakban írható:

$$\delta = \frac{\alpha}{n} \frac{(\varepsilon' - 1)1/n \{1 + o(n; n\varepsilon'; n\varepsilon'')\}}{1/n^2 \{1 + o(\varepsilon''^2; n^2)\}} \cong \alpha(\varepsilon' - 1) \quad (3.5)$$

$$\frac{1}{2} \Delta = \frac{\alpha\varepsilon''}{1 + o(n\varepsilon'; n^2)} \cong \alpha\varepsilon'', \quad (3.6)$$

ekkor a depolarizációs faktor kiesik a formulából, és a dielektromos állandó a rezonancia frekvencia eltolódással, míg a vezetőképesség az abszorpció változásal arányos.

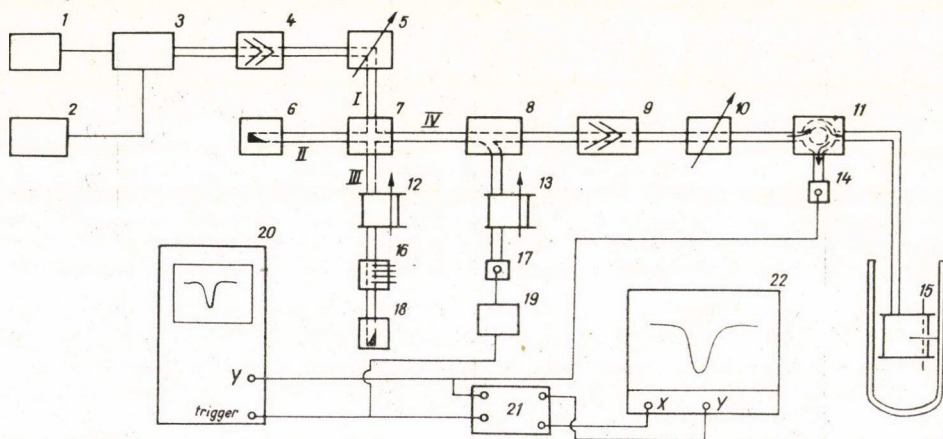
Az ötödik fejezetben tárgyalásra kerülő mérések során  $n$ -t az a) pontban leírtak alapján határoztuk meg.

Megemlítjük, hogy mikrohullámú vezetőképesség-mérés ezzel a technikával akkor is lehetséges, ha a minta vastagabb a szkin mélységnél, de mivel a vizsgált anyagoknál ilyen probléma nem merült fel, ezért ezt nem tárgyaljuk.

### 3.2 A megépített berendezés leírása

#### 3.2.1 A berendezés mikrohullámú része

A megépített berendezés blokk vázlatja a 3.4 ábrán látható. A 9 V 54 típusú 3 számmal jelzett  $X$  sávban ( $9 \cdot 10^9$  Hz középfrekvenciával) működő klisztront az 1-es tápegység működteti, frekvenciáját a 2-es számú egység egy kb. 30 MHz széles tartományban 50 Hz-es periódussal frekvencia modulálja a középfrekvencia körül. A kijövő mikrohullámok hagyományos hullámvezetőn vezetve egy izolátoron (4)



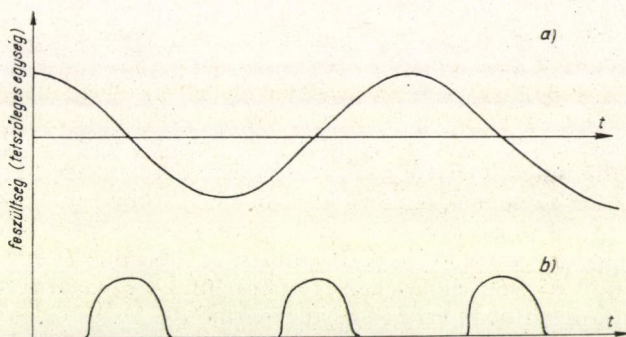
3.4 ábra. A berendezés blokk-vázlatja:

1. klisztron-tápegység, 2. 50 Hz-es moduláció, 3. klisztron, 4. izolátor, 5. változtatható attenuátor,
6. illesztett lezárás, 7. mágikus T, 8. iránycsatoló, 9. izolátor, 10. változtatható attenuátor, 11. cirkulátor,
12. kalibrált transzmissziós frekvenciamérő üreg, 13. változtatható frekvenciájú transzmissziós referencia üreg, 14. detektor, 15. mérő üreg, 16. illesztő tűskék, 17. detektor, 18. illesztett lezárás,
19. jelalak formáló, 20. oszcilloszkóp, 21. box-car, 22. X-Y író.



és egy változtatható attenuátoron (5) át egy mágikus  $T$ -be jutnak (7). Ennek egyik ága (II) egy illesztett lezáróban (6) végződik, mely minden ráeső hullámot elnyel. A harmadik ágon (III) egy transzmissziós kalibrált frekvenciamérő üreg (12), majd illesztő tüskék (16) és ugyancsak egy elnyelő lezárás (18) található. A tüskék kicsavart állapotában ebből az ágból sem jut vissza semmi a  $T$  negyedik ágába (IV), melybe így csak a kliztronból kijövő hullámok fele jut változatlanul. Ezen mikro-hullámú teljesítmény 1%-át a 8-as számú iránycsatoló leválasztja. Ez a kis teljesítmény egy változtatható frekvenciájú transzmissziós üregrezonátoron keresztül rezonancia esetén a 17 számú detektorba jut, egyébként az iránycsatolóba beépített lezáráson elnyelődik. Az iránycsatoló főágán továbbhaladó  $^{99}/_{100}$  rész egy újabb izolátoron (9) és változtatható attenuátoron (10) át egy cirkulátorba (11) jut, majd onnan az összes a reflexiós mérőüregbe (15). A mérőüreg ágából visszavert összes hullám a 14-es detektorba jut. Ez a berendezés mikrohullámú része.

A 2-es számú egység a kliztron reflektor feszültségét modulálja szinuszosan 50 Hz frekvenciával. A kliztron frekvenciájának időben lineáris változása érdekében a modulációs amplitúdót a kliztron teljes rezgési módusának lefedéséhez szükségesnél kb. 3-szor nagyobbra állítottuk, s a reflektorfeszültség alapszintjét úgy állítottuk be, hogy az oda és vissza futó módusok egymást egyenlő időközönként kövessék (3,5 ábra,  $a$ ,  $b$  görbe). Így a kliztron a szinuszos moduláció közel lineáris szakaszában működik.



3.5 ábra. A kliztron 50 Hz-es modulációjának és kiadott módusgörbéjének időbeli lefutása

Ha a mérőüreg rezonanciáját a módusgörbe közepére állítjuk, a rezonancia helyének a mért minták okozta eltolódás tartományában a kliztron frekvenciája időben lineárisan moduláltnak tekinthető. Ellenőrző méréseink szerint nem lineáritásból származó hiba a mért változások ezrelékének nagyságrendjébe esik.

A 13-as számmal jelzett transzmissziós üreg frekvencia referenciaként szolgál. Frekvenciája egy a közepébe különböző mélységig bedugott rézrúddal változtatható. A 17. sz. detektoron megjelenő jel a 3.6 ábrán a  $c$ -vel jelzett görbe.

A mérőüreg rezonanciája a 14-es számú detektoron jelenik meg (3.6 ábra  $b$  görbe). Ugyanerre a görbére ráültethető a 12-es számú kalibrált frekvenciamérő üreg jele is a 16-os illesztő tüskék becsavarásával, melyek a mágikus  $T$  III. ágából a mikro-hullámok visszaverődését, és egy részüknek a IV ágba jutását eredményezik.

A mérés során lényeges, hogy a kis minta az elnyelt mikrohullámok hatására ne melegedjen fel. A használt kliztron katalógus szerinti maximális teljesítménye



200 mW. A mágikus  $T$  IV. ágába a klisztronból kijövő teljes teljesítménynek csak a fele juthat. Az üregbe jutó teljesítményt a rezonancia szélességének és a teljes módusgörbe szélességének aránya szabja meg, mely így a teljes teljesítménynek 80–100-ad része. Ebből a minta által abszorbeált energia a  $Q$  változással arányos, ennek alapján a mintára jutó teljesítményt maximálisan 0,01 mW-ra becsüljük, feltételezve az attenuátorok teljesen nyitott állapotát. A gyakorlatban ennél durván 1 nagyságrenddel lehetett kisebb a mintára jutó teljesítmény, mivel az üreg a rendszerhez gyengén csatolt. Ez a minta és környezetének hőmérsékletében tizedfoknál kisebb eltérést okozhat csak.

Detektorként IN23D típusú félvezető diódákat használtunk. Méréseink szerint ezek ráeső teljesítmény-kiadott feszültség karakterisztikája 0,5 és 2 V kiadott feszültség között lineáris, ezért a 10-es számú attenuátorral a 14 detektoron a módusgörbe maximumát mindig 1,5 V körüli értékre állítottuk be.

A 9 izolátor és az iránycsatoló a mérőüreg jelét a frekvenciastabilizáló ágtól teljesen függetleníti. A 13-as üreg jele a 14-es detektoron, a 15 üreg jele a 17 detektoron egyáltalán nem látható.

A mérőüreg jósági tényezője igen magas  $Q \cong 22\,000$ . Ez a megfelelő mechanikai megmunkálásnak és a nem kívánt módusok elnyomásának tulajdonítható.

### 3.2.2 Frekvencia stabilizálás, elektronikus részek

Az előző fejezetben leírt viszonylag bonyolult mikrohullámú elrendezés tervezésénél a jó frekvenciastabilitás és nagy felbontás elérése volt a legfontosabb szempontunk. Ezt a 13-as referenciaüreg és egy speciális elektronika segítségével értük el.

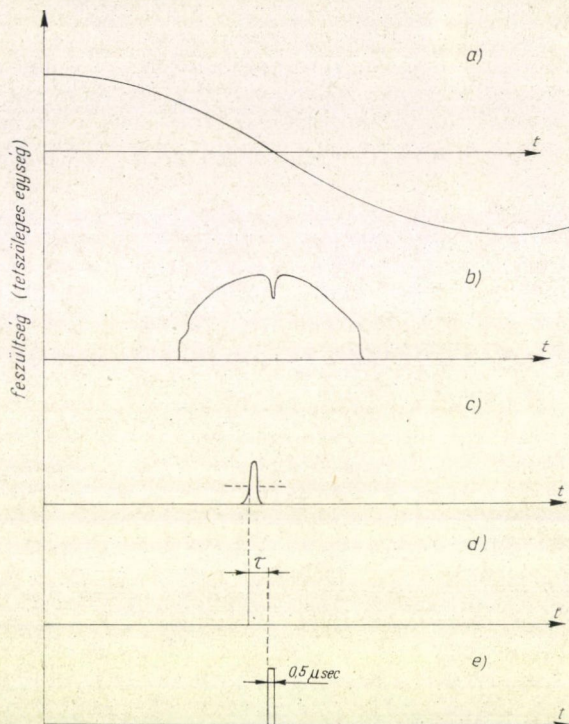
A 3.6 ábrán látható idődiagram  $a$ ,  $b$  és  $c$  része a moduláció, a 14-es és 17-es számú detektor jelének lefutását mutatja. A referenciaüreg jele ( $c$ ) a 19-es számú elektronikába jut, mely egy monostabil multivibrátor segítségével a visszafelé futó módust kiszűri, és a megmaradó jel egy (változtatható) szintjénél egy éles, 0,2  $\mu\text{sec}$ . felfutású triggeret ad ki. (3.6 ábra  $d$ ). A referenciaüreg rezonanciáját a mérőüreg rezonanciájához közel állítva, ezzel a triggerrel indítva az oszcilloszkópot (20), a 14 detektor jelét az  $Y$  bemenetre kapcsolva a mérőüreg rezonanciája megjelenik az ernyőn.

A leolvasás könnyítése és pontosabbá tétele érdekében a rezonancia jelet a 21-es számú KFKI SZTKI Elektronikus Osztályán épített ún. „box-car” elektronika segítségével egy  $X$ – $Y$  író rajzolta ki.

A box-car bemenetére a 14-es detektor jele volt kapcsolva, és ugyanaz a trigger jel indította, mint az oszcilloszkópot. Minden trigger jel után egy folyamatosan változó  $\tau$  késleltetéssel egy 0,5  $\mu\text{sec}$ -os időtartamra az elektronika kinyit (3.6/e ábra), és a kimenetén a bejövő jel ezalatt a kapuidő alatt tapasztalt nagyságával egyenlő jel jelenik meg. A  $\tau$  késleltetési idő egyenletes változása 0-tól egy változtatható értékig (10, 30, 100, 300  $\mu\text{sec}$ , 1, 3, 10, 30, 100 msec stb.) a bejövő jel egy szakaszának lassú letapogatását teszi lehetővé, a kimenetet az  $X$ – $Y$  író  $Y$  bemenetére kötve ugyanaz a lelassított jel kirajzolható. Az író  $X$  bemenetére az eltérítést ugyancsak a box-car szolgáltatja egy  $\tau$ -val arányos 10 V végértékű lineáris jel formájában. A beállított időtartamon való végighaladási idő 10 sec és 30 perc között fokozatokban állítható. A jel kis részének letapogatása esetén a nagy nagyítás miatt megjelenő zaj a kimeneti időállandó növelésével és lassúbb áthaladással volt kiintezgálható.



A módszer nagy előnye, hogy a módusgörbe közepén a referenciaüreg frekvenciája által pontosan megszabott ponttól a vizsgálni kívánt rövid frekvenciatartomány lefutásához szükséges néhány száz  $\mu\text{sec}$ -on belül a modulált klisztron stabilitása nagyságrendekkel jobb, mint a hosszúidejű frekvenciastabilitása (az egymást követő módusgörbék időbeli helyzete sokkal kevésbé stabil, mint egy módusgörbe két



3.6 ábra. A box-car működésének idődiagramja:  
a) moduláció; b) a 14-es detektor jele; c) a 17-es detektor jele;  
d) a 19 által előállított trigger; e) a box-car  
kapunyitása  $\tau$  idővel a trigger után  $0,5 \mu\text{sec}$  időtartamra

viszonylag közel levő pontja közötti időkülönbség), és a mérés frekvenciastabilitását ez szabja meg. Ennek köszönhető, hogy a berendezés frekvenciastabilitása szobahőmérsékleten  $2 \times 10^{-8}$  ( $\cong 200 \text{ Hz}$ ). A tényleges reprodukálhatóságot nem a frekvencia instabilitása, hanem a minta be- és kiforgatásával járó mechanikai eredetű pontatlanságok szabják meg.

### 3.2.3 Mérési körülmények, üzemi paraméterek

A mérőfejet a Fizika II főosztály műhelyében Nagy Sándor készítette. Az ürege áthaladó mintatartót hordozó kvarc szálát mindkét oldalon egy-egy tengelyezett szorítópofa tartotta, s az azon levő fogaskerék áttétel segítségével volt forgatható. A mérőüreg egy dupla üveg kriosztátba volt helyezve, melynek teteje vákuumbizto-



san zárt, a mintatartót forgató rúd vákuumbiztos tömítő szelencén át volt kivezetve, mely a forgatást nem gátolta. A mérőfej hűtése a külső kriosztátba cseppfolyós nitrogén, a belsőbe cseppfolyós hélium töltésével történt. A mérőüreg a minta He betöltésnél való védelme érdekében egy rozsdamentes acél dobozba volt zárva, a folyékony He-al egy hidegújon keresztül érintkezett. Fűtése az üreg külső falára tekert kerámiába ágyazott fűtőszál segítségével történt. A hőmérsékletet egy az üreg falán elhelyezett platina ellenállás-hőmérő segítségével lehetett mérni  $\pm 0,1^\circ$ -os pontossággal. (Az üreg fala 4—5 mm vastag vörösréz, belsejében a hőmérséklet tized fokon belül egyezik a fal hőmérsékletével még viszonylag gyors hűtés vagy fűtés esetén is.)

A mintának a mintatartóra való helyezése előtt minden esetben ellenőriztük a mintatartó kiegyensúlyozottságát. Ezután a kalibrált frekvenciamérő üreg segítségével beskaláztuk az  $X—Y$  író által lefedett tartományt. A leírásra kerülő mérések során általában a milliméter papíron 1 mm 9—10 kHz-nek felelt meg (lásd 3.2 ábrát). A legérzékenyebb használt állásban 1 mm  $\sim 1$  kHz volt.

Ezután a rendszert lehűtöttük 4,2 K-re és a méréseket az üreget 300 K-ig fűtve He atmoszférában végeztük. Elektronikus hőmérséklet-stabilizálásra az üreg nagy tömege miatt nem volt szükség.

Szobahőmérséklet és 4,2 K között az üres üreg rezonancia frekvenciája kb. 20 MHz-et változik, ez azonban az eredményben csak ezrelék nagyságú hibát okoz, ezért figyelembevétele nem szükséges.

Minden hőmérsékleten kirajzoltuk a rezonanciagörbét a mintatartó mindkét szélső állapotában (minta bent és minta kint), valamint az ezekre merőleges állapotot, ahol a teljes mintatartó az üregeken belül volt. Ez utóbbi állapotban az extra teflon mennyiség az üreg rezonanciáját az előző kettőtől messze eltolta, az így kapott görbét használtuk alapvonalként (3.2 ábra). A minta által okozott rezonanciaeltolódás ( $\delta$ ) a felvett görbékéről közvetlenül leolvasható,  $\Delta$ -t a félértékszélesség változást az amplitúdók és az üres üreg félértékszélességének leolvasásával

$$\Delta = \Delta_u \left( \frac{A_m}{A_u} - 1 \right)$$

adja, ahol  $\Delta_u = 1/Q_u$  az üres üreg  $Q$ -jának reciproka,  $A_u$  és  $A_m$  a rezonancia amplitúdója üresen és mintával.

Ez a dolgozatban leírt mérések esetén (1 mm  $\sim 10$  kHz-es skálán) a rezonancia frekvencia shiftjének  $\pm 10$  kHz a szélesség változásának  $\pm 2—3$  kHz pontosságú meghatározását tette lehetővé. Ezekben az esetekben jobb felbontás elérése nem is volt szükséges, mivel a mérendő effektusok ezeknél általában egy nagyságrenddel nagyobbak voltak. A berendezés érzékenységének illusztrálására a 3.7 ábrán bemutatjuk a  $\text{Py}(\text{TCNQ})_2$ -n végzett dielektromos állandó és vezetőképesség mérés eredményét, a  $\text{Py}(\text{TCNQ})_2$  80 K körüli érdekes fázisátalakulása körül. (Az eredményeket a jelen dolgozatban nem diszkutáljuk, a siófoki konferencián kerültek bemutatásra [40].) A piridinium  $(\text{TCNQ})_2$ -n a mérendő effektusok sokkal kisebbek, itt az  $X$  és  $Y$  skálák nagyításával  $\pm 2$  kHz és  $\pm 200$  Hz-es felbontást sikerült elérnünk shiftben, illetve félértékszélességben. Pillanatnyilag ez tekinthető a berendezés teljesítőképesség határának. Az összehasonlítás kedvéért az alábbi táblázatban felsoroljuk más laboratóriumokban működő hasonló berendezések között paramétereit:



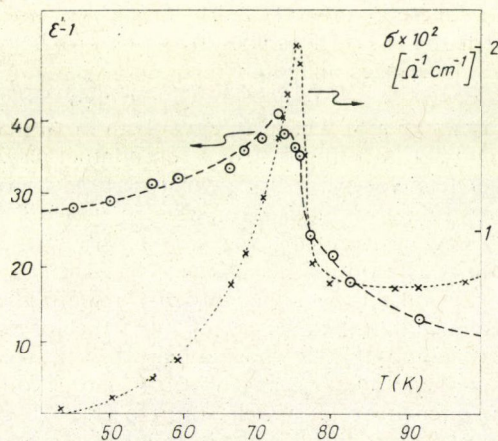
	közép frekvencia	shiftben	felbontás vonal szélességben
Univ. of Pensylvánia [34]	10,1 GHz	10 kHz	10 kHz
John Hopkins Univ. [37]	9,3 GHz	10 kHz	10 kHz
Washington [38]	9,3 GHz	—	3—4 kHz
Csernogolovka [2]	9,3 GHz	10 kHz	5 kHz
KFKI	9,1 GHz	2 kHz	200 Hz

A leírások alapján megállapítható, hogy a KFKI-ban működő berendezés jobb felbontása a választott detektálási módnak és a használt üregek jósági tényezőjében levő különbségeknek tulajdonítható.

Mind a négy felsorolt laboratóriumban transzmissziós mérőüreget használnak, ezek  $Q$ -ja a második csatoló lyuk miatt szükségképpen rosszabb. A berendezések alacsony teljesítménynél dolgoznak, s a detektorokat karakterisztikájuk négyzetes tartományában használják, a detektált jelek  $10\ \mu\text{V}$  nagyságrendűek. A csernogolovkai csoport [2] a leolvasáshoz oszcilloszkópot használ, amely szükségképpen pontatlanabb az általunk használnál. A pennsylvániai csoport [34] (hasonlóképpen a másik kettő is) a klisztron frekvenciáját lassan sweepelve  $X-Y$  íróval rajzolja ki a rezonancia-görbéket, a zaj csökkentése érdekében, lock-in-os detektálási technikát használva. Noha feltehetőleg az általuk használt mikrohullámú forrásba be van építve egy üreg, melynek frekvenciájára stabilizált a klisztron, felbontásukat annak hosszú idejű (a rezonancián való áthaladás a jó jel/zaj viszony elérésének érdekében néhány percre veszt igénybe) frekvencia stabilitása szabja meg.

Az általunk épített berendezésben az üreg jósági tényezője durván egy 4-es faktorral nagyobb a pennsylvániai csoportban használnál. Az alapvető különbség a detektálás eltérő módjában van. A box-car-os technika a lock-in-os technikával szemben lehetővé teszi, hogy anélkül, hogy a mintára nagy átlagteljesítmény jutna, a detektorokat karakterisztikájuk lineáris tartományában használjuk, ahol kevésbé zajosak.

A megépített referenciaüreg a drágább mikrohullámú forrásokba beépített stabilizáló üreg megfelelője. A lényeges különbség az, hogy a jel kirajzolhatóvá való lelassítása a box-car-al történik, és nem a klisztron frekvencia lassú végighaladásával. A kirajzolt jel minden egyes pontja a referencia frekvencia elérésétől számított 1 msec-on belül kerül mérésre, így a felbontást a klisztronból és a referencia üregből álló „mikrohullámú forrás” 1 msec-on belüli stabilitása szabja meg, szemben (a mások által használt) lényegében ugyanennek a rendszernek néhány perces stabilitásával.

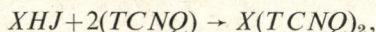
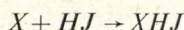


3.7 ábra. A  $\text{Py(TCNQ)}_2$  vezetőképességének és dielektromos állandójának hőmérséklet-függése 40 K és 100 K között. A 40-es dielektromos állandó kb. 40 kHz eltolódásnak az  $1 \cdot 10^{-3} \Omega^{-1} \text{cm}^{-1}$  vezetőképesség 250 Hz kiszélesedésnek felelt meg



#### 4. Anyagminták

A használt anyagokat a KFKI-ban *Ritvayné Emandity Katalin* és *Pintér Katalin* szintetizálta. A szintézis menete mind a négy anyagra ugyanaz volt [41].



ahol X a donort jelenti. Az első lépés a molekulában levő N atomra (vagy atomokra a BIP-ek esetén) egy H-t ültet, és jóddal egy ionos sót képez. A második lépés a jódot TCNQ-val helyettesíti. A reakció forrásban levő acetonitril oldatban játszódott le, az oldatot lassan lehűtve lilás-fekete tűkristályok formájában vált ki a végtermék. A keletkező kristályok átlagos mérete  $2-3 \times 0,05 \times 0,05$  mm volt.

A kristályok növesztésével néhány esetben *Erőné Gács Mária* és a szerző próbálkozott, ún. diffúziós módszer segítségével [42]. Ez a módszer lényegében a szintézis utolsó lépését lassítja le, az elrendezés egy üvegcsűrővel három részre osztott üvegcsőből áll. A két kiindulási anyagot a két oldalsó részbe töltve a középső részt oldószerrel feltöltve, ezt egy termosztátba helyeztük, 1–2 hét alatt lassan lehűtöttük. Az eredmény a 4.1 ábrán látható, a középső részben 4–6 mm hosszú kristályok váltak ki.

Szintézis után az anyagok kémiai analízisnek lettek alávetve. Acetonitrilbe visszaoldva őket látható spektrumukból a semleges és ionos TCNQ molekulák aránya megmondható [43]. Mind a négy anyag esetén mind a két vizsgálat megerősítette az 1:2 összetételt. A 2–2' és 4–4' BIP(TCNQ)<sub>2</sub> esetében a BIP molekulák fele semleges, fele kétszeresen ionizált.

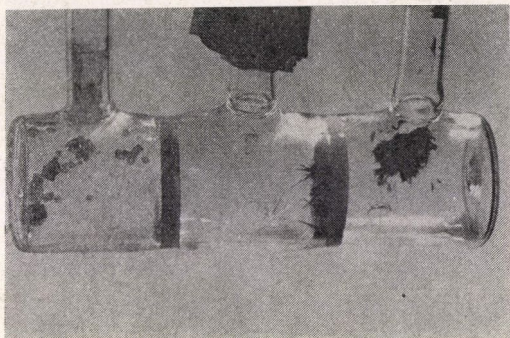
Kristályszerkezet meghatározást anyagjainkon sajnos nem tudtunk végezni. Szerencsére a Qn(TCNQ)<sub>2</sub> kristályszerkezete az irodalomból ismert, a 4.2 ábrán látható [44]. Az ábrán besatírozott körökkel van jelezve a N atom helye a Qn molekula két lehetséges állapotában.

Az N-metil-kinolinium (TCNQ)<sub>2</sub> preparálás után kb. 50%/mol acetonitrilt tartalmaz [28, 45], mely egy olyan fázist stabilizál (A fázis), melynek tulajdonságai mint azt látni fogjuk, sok szempontból hasonlóak Qn(TCNQ)<sub>2</sub>-éihez [46]. Az anyagot felmelegítve 120 °C körül a lazán kötött acetonitril eltávozik, és egy merőben más tulajdonságokkal rendelkező stabil (B) fázist kapunk [28].

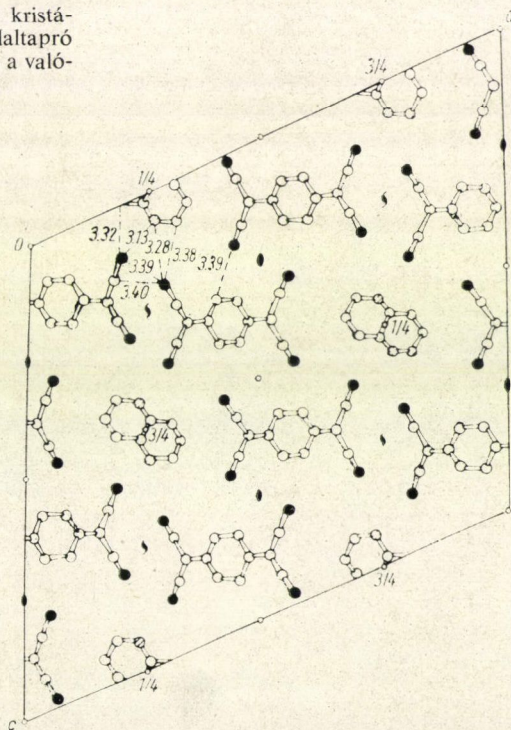
Az acetonitril távozása 6% súlycsökkenést eredményez, mely 55%/mol acetonitril tartalomnak felel meg. Differenciál scanning kalorimetriás vizsgálatok  $\Delta H = 12$  kcal/mol entalpiaváltozást mutattak, ami összehasonlítva más hasonló anyagokon találtakal [45] kb. 40–50%/mol acetonitril elpárolgásának felel meg. Hagyományos NMR vizsgálat egy keskeny és egy szélesebb jel összegét mutatja [28], a keskeny jelet a gyengén kötött, mozgékony acetonitril molekuláknak tulajdonítva, az intenzitásokat összehasonlítva az előző arány megerősítését kaptuk. Porröntgen és elektron diffrakciós kísérletek azt mutatják, hogy az acetonitril molekuláknak nincs határozott helyük a kristályrácsban, a láncok között helyezkednek el rendezetlenül, az A és B fázis struktúrája között nincs lényeges különbség. A Zágrábban végzett porröntgen és elektrondiffrakciós kísérletekből meghatározott rácsállandókat mutatja az alábbi táblázat [28].



	láncon belüli TCNQ távolság (Å)	átlagos láncok közötti távolság (Å)
$\text{On}(\text{TCNQ})_2$	3,16 3,22 [44]	12,86 12,85 [44]
$\text{NMeQn}(\text{TCNQ})_2$ A fázis	3,174	14,88
$\text{NMeQn TCNQ}_2$ B fázis	3,244	13,56



4.1 ábra. Kristálynövesztő. Baloldalt TCNQ kristályok, középen 4–6 mm hosszú, jobboldaltapró  $\text{Qn}(\text{TCNQ})_2$  kristályok láthatók (A fénykép a valószínű méret 1:2 arányú kicsinyítése)



4.2 ábra. A  $\text{Qn}(\text{TCNQ})_2$  kristályszerkezete: láncokra merőleges metszet. A vonalkázott körök a N atom két lehetséges helyét mutatják [44]



Az *A* és *B* fázis rácsállandói közötti kis különbség az acetonitril jelenléte vagy hiánya által okozott kristálykötési energiakülönbségnek tulajdonítható. Rácstöbbszöröződés egyik fázisban sem figyelhető meg.

A fentiek alapján (bár közvetlen bizonyítékunk nincs rá) azt gondoljuk, hogy az  $\text{NMeQn}(\text{TCNQ})_2$  kristályszerkezete hasonló a  $\text{Qn}(\text{TCNQ})_2$ -éhoz mindkét fázisban.

Mindössze egy különbséget tételezünk fel, azt, hogy az  $\text{NMeQn}(\text{TCNQ})_2$ -ban a donorok nem rendezetlenül helyezkednek el, hanem alternálva. Ezt az alábbiakra alapozzuk:

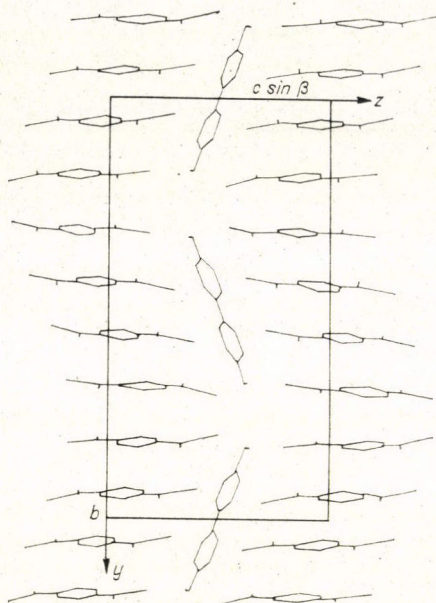
1. A metil csoport jelenléte miatt: geometriailag kedvezőbb, ha a metil csoportok elkerülnek egymást.

2. A Qn-nál eggyel kevesebb gyűrűt tartalmazó piridiniumból készült  $\text{Py}(\text{TCNQ})_2$ -ben a Py molekulák helyzete rendezett a Py molekulák nagy dipólmomentuma miatt. A Qn dipólmomentuma ezért nagy valószínűséggel elegendő az 1. pontban leírtakkal együtt a rendeződéshez.

A 2—2' BIP(TCNQ)<sub>2</sub> és 4—4' BIP(TCNQ)<sub>2</sub> pontos szerkezetét nem ismerjük, de ismert a 4—4'—BIP dietil származékának hasonló összetételű sójának a szerkezete, mely a 4.3 ábrán látható.

Végezetül a preparált kristályok egy szembevetendő morfológiai sajátosságát szeretnénk megemlíteni. Szembevetendő a különbség a  $\text{Qn}(\text{TCNQ})_2$  és a 2—2' BIP(TCNQ)<sub>2</sub> között.

BIP(TCNQ)<sub>2</sub>, valamint az  $\text{NMeQn}(\text{TCNQ})_2$  és a 4—4' BIP(TCNQ)<sub>2</sub> kristályok között mikroszkóp alatt vagy akár szabad szemmel nézve. Az első kettőnek határozottan rostos szerkezete van, a kristályok hosszában könnyen elhasíthatók, míg az utóbbiak sokkal masszívabb, igazi egykristályok, általában vastagabbak is.



4.3 ábra. Az N—N'-dietil—4—4'-BIP(TCNQ)<sub>2</sub> kristályszerkezete [47]

## 5. Kísérleti eredmények

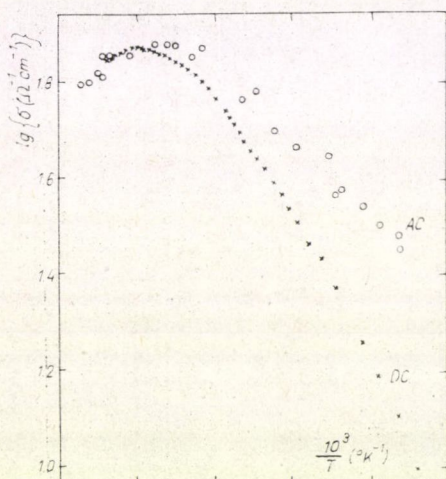
Ebben a fejezetben 4 kvázi egydimenziós TCNQ alapú komplex són végzett mikrohullámú ellenállás és dielektromos állandó mérések eredményeiről számolunk be. Mivel a mikrohullámú vezetőképesség az egyenáramúval összehasonlítva érdekes, az egyenáramú vezetőképesség mérések eredményeit is közöljük, melyek Mihály György munkái.

### 5.1 Kinolinium (TCNQ)<sub>2</sub> [10]

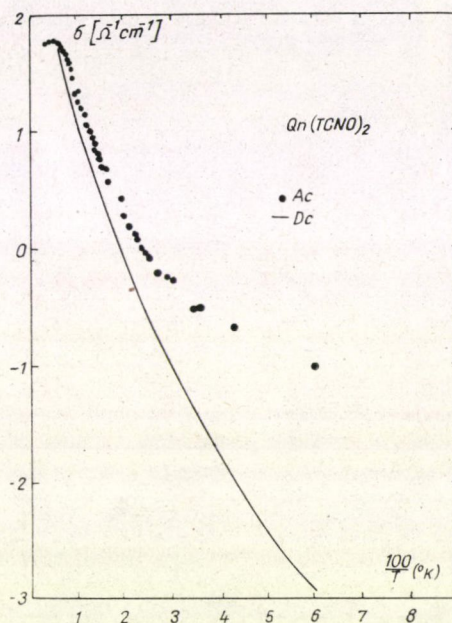
A  $\text{Qn}(\text{TCNQ})_2$  szobahőmérsékleti mikrohullámú (a továbbiakban a. c.) vezetőképessége  $\sigma(300 \text{ K}) = 70 \pm 5 \Omega^{-1} \text{ cm}^{-1}$  méréseink szerint, ami egyezik mások méréseivel [1, 9] és az egyenáramú (a továbbiakban d. c.) vezetőképesség mérés eredmé-



nyével. Az 5.1 ábra mutatja az a. c. és d. c. vezetőképesség hőmérséklet-függését 100 és 300 K között  $\lg \sigma$  és  $1/T$  skálán. A vezetőképességnek 250 K körül egy elkent maximuma van, alatta félvezető jellegű hőmérséklet-függést mutat. Szobahőmérséklet és a maximum között az a. c. és a d. c. mérés követi egymást, az ellenállás 250 K-ig 10%-kal csökken. Közvetlenül a d. c. vezetőképesség maximumánál az a. c. vezetőképesség elválík a d. c.-től, és 100 K körül már egy hármassal nagyobb, mint a d. c.



5.1 ábra. A  $\text{Qn(TCNO)}_2$  mikrohullámú (a. c.) és egyenáramú (d. c.) vezetőképességének hőmérséklet-függése 100 K és 300 K között



5.2 ábra. A  $\text{Qn(TCNO)}_2$  a. c. és d. c. vezetőképessége 15 K és 300 K között

Az 5.2 ábra mutatja az a. c. és d. c. vezetőképességet 15 K és 300 K között. A különbség a kettő között a hőmérséklet csökkenésével egyre nő, 20 K körül az a. c. vezetőképesség már több mint egy nagyságrenddel nagyobb a d. c.-nél.

Mind az a. c., mind a d. c. vezetőképesség a  $\lg \sigma - 1/T$  skálán folyamatosan görbül, vezetéshez szükséges aktiválási energia folyamatos csökkenését mutatva alacsonyabb hőmérsékleten.

Az 5.3 ábra a mikrohullámú dielektromos tényező hőmérséklet-függését mutatja.  $T \rightarrow 0$ -ra  $\epsilon' \rightarrow 420$  növelve a hőmérsékletet gyorsan növekszik. 80–100 K körül mérésünk egyezik Zolotuhin és munkatársainak [9] 2.2 fejezetben idézett eredményeivel (2.2 ábra). 100 K fölött  $\epsilon''$  már sokkal nagyobb, mint  $\epsilon'$  és  $1/n$ , ezért nem tudtuk  $\epsilon'$ -t tovább mérni.

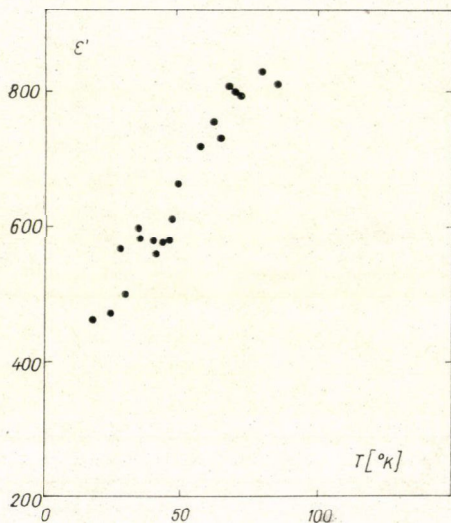
A használt minták átlagos mérete  $3,5-4 \times 0,05 \times 0,05$  mm volt. ( $\epsilon'$  teljes hőmérséklet tartományon való meghatározásához egy kb. 8 mm hosszú mintára lett volna szükség).



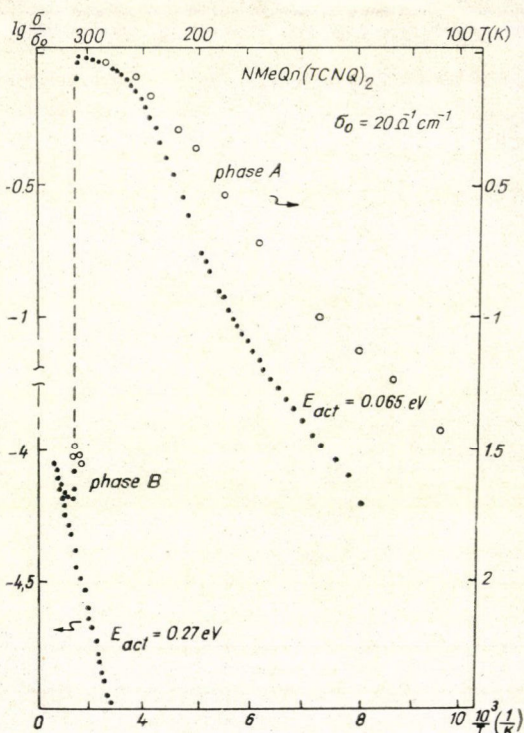
5.2 *N*-metil-kinolinium (TCNQ)<sub>2</sub> [28, 46]

Mint azt a 4. fejezetben leírtuk az NMeQn(TCNQ)<sub>2</sub> két fázisban létezik. Közvetlen preparálás után kb. 50%/mol acetonnirtilt tartalmaz (*A* fázis), 120 °C-ra felmelegítve az acetonnirtil eltávozik az anyagból (*B* fázis).

Az *A* fázis szobahőmérsékleti vezetőképessége  $\sigma(300\text{ K}) = 20 \pm 10\ \Omega^{-1}\text{cm}^{-1}$  a d. c. méréssel egyezésben. Az 5.4 ábra mutatja az *A* és *B* fázis a. c. és d. c. vezetőképességének hőmérséklet-függését 100 K és 430 K között. A vezetőképesség az *A* fázisban folyamatosan csökken, noha látszik a tendencia a telítődésre 300 K



5.3 ábra. A Qn(TCNQ)<sub>2</sub> dielektromos állandójának hőmérséklet-függése



5.4 ábra. Az NMeQn(TCNQ)<sub>2</sub> a. c. (○) és d. c. (●) vezetőképessége 100 K fölött az *A* és *B* fázisban

körül, illetve fölött. Szobahőmérséklettől az a. c. vezetőképesség folyamatosan válik szét a d. c.-től a hőmérséklet csökkenésével, 100 °K-nél az a. c. vezetőképesség kb. 7-es faktorral nagyobb, mint a d. c. Mind az a. c., mind a d. c. mérés folyamatosan görbül az  $\lg \sigma - 1/T$  grafikonon.

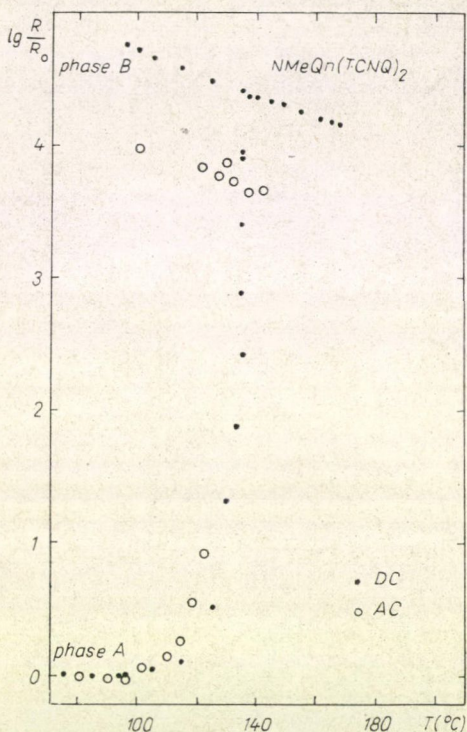
Az 5.5 ábra az a. c. és a d. c. ellenállás változását mutatja az átalakulás körül. A d. c. ellenállás mintegy 4 nagyságrendnyi változását a a. c. ellenállás nagyon jól követi. A *B* fázisban a hőmérséklet csökkentésével rohamosan növekedő ellenállás miatt (a kis veszteség miatt) részletes hőmérséklet-függést nem tudtunk felvenni.



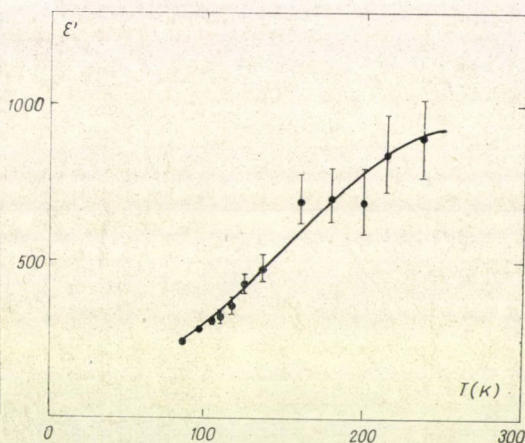
Az 5.6 ábra az *A* fázis dielektromos tényezőjének hőmérséklet-függését mutatja a mérhető tartományban. Legalacsonyabb mért értéke 100 °K körül  $\epsilon' \cong 250$  növelve a hőmérsékletet ugyanolyan jellegű gyors növekedést mutat, mint a  $\text{Qn}(\text{TCNQ})_2$ .

A *B* fázis szobahőmérsékleti dielektromos állandója  $\epsilon' = 4,4 \pm 0,5$ .

A mérésekhez használt kristályok átlagos mérete  $6 \times 0,2 \times 0,3$  mm volt.



5.5 ábra. Az a. c. és d. c. ellenállás ugrása az  $\text{NMeQn}(\text{TCNQ})_2$  fázisátalakulása körül



5.6 ábra. Az  $\text{NMeQ}(\text{TCNQ})_2$  *A* fázisában a dielektromos tényező hőmérséklet-függése

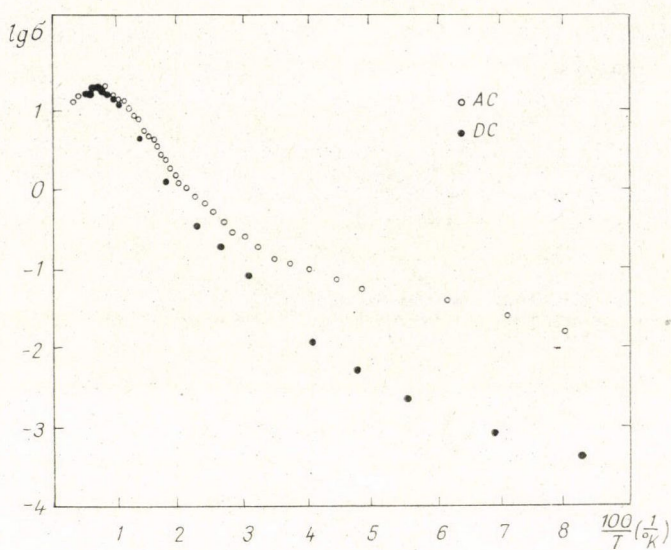
### 5.3 2—2' Bipiridinium $(\text{TCNQ})_2$ és 4—4' Bipiridinium $(\text{TCNQ})_2$ [48, 49]

A 2—2' BIP $(\text{TCNQ})_2$  szobahőmérsékleti vezető képessége  $\sigma(300 \text{ K}) = 40 \pm 5 \Omega^{-1} \text{cm}^{-1}$  volt. Az a. c. és d. c. vezetőképesség hőmérséklet-függését az 5.7 ábra mutatja, mely a  $\text{Qn}(\text{TCNQ})_2$ -éhoz igen hasonló. A vezetőképességnek 150 K körül egy lomha maximuma van, szobahőmérséklet és a maximum között az ellenállás-csökkenés 15%.

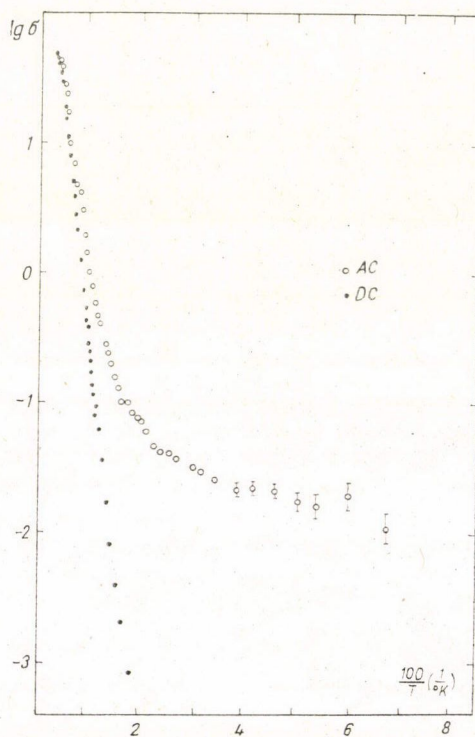
A maximum alatt az a. c. és d. c. vezetőképesség folyamatosan szétválik 20 K-nél az a. c. már több mint egy nagyságrenddel nagyobb, mint a d. c. Egyik mérés sem fittelhető egy vagy két aktiválási energiával a maximum alatt.

A 4—4' BIP $(\text{TCNQ})_2$  szobahőmérsékleti vezetőképessége valamivel nagyobb  $\sigma(300 \text{ K}) = 70 \pm 5 \Omega^{-1} \text{cm}^{-1}$ . Az 5.8 ábrán látható az a. c. és d. c. vezetőképesség





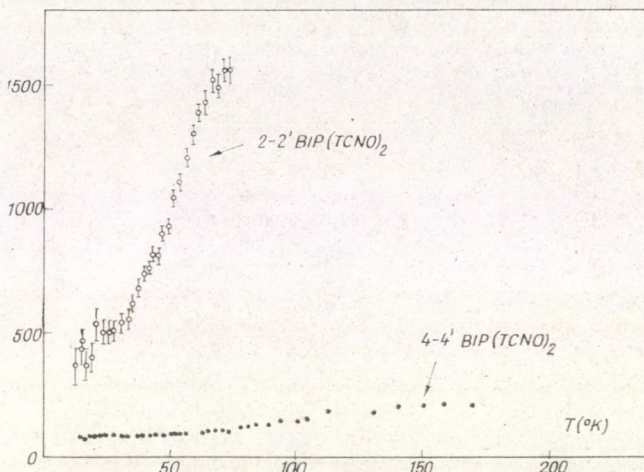
5.7 ábra. A 2—2' BIP(TCNQ)<sub>2</sub> a. c. és d. c. vezetőképességének hőmérséklet-függése



5.8 ábra. A 4—4' BIP(TCNQ)<sub>2</sub> a. c. és d. c. vezetőképességének hőmérséklet-függése



hőmérséklet-függése. Míg a d. c. mérés a mért tartományban (60 K alatt a minta ellenállása túl nagy volt) egy határozott aktiválási energiát mutat  $\Delta E_{ac} \cong 0,08$  eV, addig az a. c. mérésre két, többé-kevésbé határozott aktiválási energia illeszthető. 100 K felett az a. c. vezetőképesség a d. c.-t viszonylag jól követi, aktiválási energiája szinte ugyanaz. 100 K alatt a. c. mérés erősen elhajlik, és 60 K alatt már ismét egy határozott, de jóval kisebb  $\Delta E_{ac} \cong 0,002$  eV-os aktiválási energiát mutat.



5.9 ábra. A 2—2' és a 4—4' BIP(TCNQ)<sub>2</sub> dielektromos tényezőjének hőmérséklet-függése

Az 5.9 ábra a 2—2' és a 4—4' BIP(TCNQ)<sub>2</sub> dielektromos tényezőjének hőmérséklet-függését mutatja. Alacsony hőmérsékleten a 2—2' BIP(TCNQ)<sub>2</sub>-re  $\epsilon' \cong 360$ , a hőmérséklet növelésével a Qn(TCNQ)<sub>2</sub> esetében is megfigyelt gyors növekedést mutatja. A 4—4' BIP(TCNQ)<sub>2</sub> dielektromos tényezője 10 K körül  $\epsilon' \cong 85$  a hőmérséklet növelésével sokkal lassabban növekszik, 100 K körül csak 170 körül van szemben a 2—2' BIP(TCNQ)<sub>2</sub>-ével, mely kisebb hőmérséklet-tartományon több, mint egy 5-ös faktort változik.

A mérésekhez használt minták átlagos mérete  $4 \times 0,03 \times 0,04$  mm volt a 2—2' BIP(TCNQ)<sub>2</sub> esetén, illetve  $2,5-3 \times 0,07 \times 0,03$  a 4—4' BIP(TCNQ)<sub>2</sub> esetén.

## 6. Az eredmények értelmezése

A mikrohullámú mérések, a vezetés megfigyelt diszperziója és a dielektromos állandó a vezetési mechanizmusról hordoznak információt. Minden elméletnek számot kell adni az

- a megfigyelt, egyes esetekben anomálishan nagy, dielektromos állandókról,
- a dielektromos állandó hőmérséklet-függéséről,
- a vezetőképesség diszperziójáról.

Az anyagok tulajdonságairól pontos kép csak széles körű vizsgálatok eredményeinek összevetése alapján alakítható ki, ami a jelen dolgozatnak nem feladata. A mikrohullámú mérések alapján azonban lehetőség van az egyes anyagok vezetési mechanizmusára vonatkozó kvalitatív kép kialakítására.



### 6.1 Belső rendezetlenséget nem tartalmazó anyagok

A 4—4' BIP(TCNQ)<sub>2</sub>, melyben a donormolekula szimmetrikus és az NMeQn(TCNQ)<sub>2</sub> B fázisa, mely nem tartalmaz oldószert, mentesek a TCNQ-sókban gyakori belső rendezetlenségtől. Ezekben az anyagokban csak rácshibák és szennyezések okozhatnak eltéréseket a teljes periodicitástól.

A 4—4' BIP(TCNQ)<sub>2</sub> a. c. és d. c. vezetőképessége 100 K fölött együtt halad, egy jól meghatározott  $\Delta E = 0,08$  eV-os aktiválási energiát mutatva. Dielektromos állandója gyengén hőmérsékletfüggő, alacsony hőmérsékleten  $\epsilon' \cong 90$ . Egy 1 d fél-vezető sávmodellrel feltételezve a vezetőképességből meghatározott  $\Delta = \Delta E = 0,16$  eV-os gappal a dielektromos állandó [34] nulla hőmérsékleten

$$\epsilon' = 1 + \frac{2}{3} \left( \frac{\hbar \omega_p}{\Delta} \right)^2, \quad (6.1)$$

ahol a plazmafrekvencia  $\omega_p$  erősen kötött elektronközeliítésben

$$(\hbar \omega_p)^2 = 16 N e^2 a^2 t \quad (6.2)$$

és  $4t$  a sáv szélesség.  $\Delta$  magas hőmérsékleten és  $\epsilon'$  alacsony hőmérsékleten mért értékét használva a sáv szélességre  $4t \cong 0,8$  eV-ot kapunk. Ez durván 2-es faktossal nagyobb annál az értéknél, ami ezekben az anyagokban elfogadott [1], de a jó nagyságrend és a vezetőképesség magas hőmérsékletű frekvenciafüggetlensége kiterjedt elektron-állapotok hozzájárulását mutatja, mind a dielektromos állandóhoz, mind a vezetéshez.

Az a. c. vezetőképesség 100 K alatti gyors elhajlása és 60 K alatti kis  $\Delta E_{ac} = 0,002$  eV-os aktiválási energiája ugyanakkor a Fermi felülethez közel levő lokalizált állapotok jelenlétét mutatja. Ezek a d. c. vezetéshez nem járulnak hozzá (a mért tartományon belül), de kis energiával gerjeszthető polarizált állapotok nagy frekvencián egy extra polarizációs eredetű vezetést ad [1, 6]. Járuléka a dielektromos állandóhoz ugyanakkor megmagyarázza, hogy a mért érték miért nagyobb, mint a kiterjedt állapotokkal értelmezhető érték.

Az NMeQn(TCNQ)<sub>2</sub> B fázisában az a. c. és d. c. vezetőképességet nagyságrendben azonosnak találtuk. Ez az egyezés bizonyítja, hogy az ellenállás 4 nagyságrendnyi gyors növekedését 120 °C körül nem az anyag szublimálása vagy bomlása okozza, hanem az acetonnitril távozása, és az anyag ezután is „jó” anyag marad.

Mivel az NMeQn molekula a rajta levő metil csoport miatt geometriailag is aszimmetrikus, ez feltehetőleg a donor láncon belüli rendezett, alternáló elhelyezkedéséhez vezet. Ezért feltételezhetjük, hogy a B fázis nem tartalmaz belső rendezetlenséget. Részletes strukturális adatok hiányában ezt a feltételezést a vezetőképesség hőmérséklet-függésében megmutatkozó éles gap megfigyelése is alátámasztja. Az a. c. vezetőképesség részletes hőmérséklet-függése a B fázisban nem áll rendelkezésünkre.

Szuszeptibilitás mérésekből a B fázisban a sáv szélesség  $10^{-2}$  eV-ra becsülhető [28]. A d. c. vezetőképesség mérésekből meghatározott  $\Delta = 0,54$  eV-al a (6.1) formulából  $\epsilon' \cong 1,2$  adódik nulla hőmérsékleten. A megfigyelt  $\epsilon' = 4,4 \pm 0,5$  szobahőmérsékleti dielektromos állandó ezzel jól összeegyeztethető, az esetleges  $T = 0$ -n is meglevő eltérés az anyagban levő nagy molekulák és ionok polárizálhatóságával könnyen magyarázható [1].



Megállapíthatjuk, hogy a vizsgált belső rendezetlenséget nem tartalmazó anyagok vezetésében magas hőmérsékleten az elektronok gap fölötti kiterjedt állapotokba való gerjesztése játszik domináns szerepet, félvezető-viselkedést és a vezetőképeség frekvenciafüggöttségét eredményezve. Alacsony hőmérsékleten a szennyezések és rácshibák által okozott ritka véletlenszerű perturbáló potenciál a sávszerkezet 1.4/a ábrához [31] hasonló kismértékű változását eredményezi. A sávban levő állapotok gyenge lokalizáltsága vagy teljes kiterjedtsége között nem tudunk különbséget tenni. Ugyanakkor a gapben megjelenő erősen lokalizált állapotoknak lényeges szerepe van. A Fermi felület közelében létrehozott kisszámú lokalizált állapot az a. c. vezetőképeséghez extra polarizációs járulékot ad. A kétféle, a gapben és azon kívül levő vezetéshez járulékot adó elektronállapotok lokalizáltságában levő nagy különbség egy éles mobilitás gapként [6, 50] mutatkozik meg, a gapben levő állapotok a d. c. vezetéshez nem járulnak hozzá. A dielektromos állandó gyengén hőmérsékletfüggő, nagyságának kialakításában a gap fölötti kiterjedt és gapben levő lokalizált állapotok egyaránt szerepet játszanak.

A gap megjelenését az  $\text{NMeQn(TCNQ)}_2$  B fázisában és 4—4' BIP(TCNQ)<sub>2</sub>-ben különböző (a két anyagban nem feltétlen azonos) mechanizmusok eredményezhetik: elektron—fonon kölcsönhatás, amely rácsorzulásra vezetne [3], láncan belüli Coulomb kölcsönhatások [1, 24, 20, 51] vagy a láncok közötti csatolás [27, 28, 52].

Az  $\text{NMeQn(TCNQ)}_2$  esetében a porröntgen és elektron-diffrakciós mérések a TCNQ molekulák ekvidistáns elhelyezkedését mutatták (4 fejezet), ez kizárja a szokásos Peierls instabilitással való érvelést.

A 4—4' BIP(TCNQ)<sub>2</sub> esetén egy ilyen hatás érvényesülése nem zárható ki, sőt a hasonló N—N'-dietil-4—4' BIP (TCNQ)<sub>2</sub> só rendelkezésre álló kristályszerkezete (4.2 ábra) a rácsállandó négyszereződését mutatja [47], a TCNQ molekulák nem egyenlő távolságra helyezkednek el, bár a különbség igen kicsi. Ez a speciális struktúra a láncan belüli és a láncok közötti Coulomb kölcsönhatásokkal együtt, vagy azok nélkül, vezethet a gap kialakulásához. A hatások szétválasztása szerkezeti adatok és más vizsgálatok hiányában nem lehetséges.

Az  $\text{NMeQn(TCNQ)}_2$  esetében a TCNQ lánc megfigyelhető torzulásának hiányában a gap megjelenéséért korrelációs effektusok felelősek. A rendezett donorelrendeződés az azonos helyen levő elektronok közötti Coulomb tasztítással együtt egy, a donor dipolmomentumával arányos, gapet eredményez [53]. Hasonlóképpen lehetséges a gap magyarázata a láncok közötti Coulomb kölcsönhatással is, mely a láncok mentén töltéshullámokat hoz létre [28]. Mindkét magyarázat jól összeegyeztethető a mért gap értékével. A két mechanizmus eredménye között jelenlegi vizsgálataink alapján nem tudunk különbséget tenni, valószínűleg mindkettő részt vesz a gap végső értékének kialakításában.

## 6.2 Belső rendezetlenséget tartalmazó anyagok

A  $\text{Qn(TCNQ)}_2$  és a 2—2' BIP(TCNQ)<sub>13</sub> donormolekulái geometriailag szimmetrikusak, de bennük a N atomok elhelyezkedése aszimmetrikus, ami az anyagok belső rendezetlenségét okozza a molekulák kristályrácsban való véletlenszerű orientációja miatt [16]. Az  $\text{NMeQn(TCNQ)}_2$ -ben a láncok közé véletlenszerűen beépült oldószer-molekulák okoznak belső rendezetlenséget [28]. Ezekben az anyagokban a vezetőképeség megfigyelt diszperziója jellegzetesen eltér a 4—4' BIP(TCNQ)<sub>2</sub>-n megfigyeltektől. Az a. c. és d. c. vezetőképeség szétválása közvetlenül a maximum



alatt kezdődik, nem válnak szét különböző aktiválási energiával fittelhető hőmérséklet-tartományok, a vezetőképesség a  $\lg \sigma - 1/T$  skálán folyamatosan görbül. A vezetőképesség maximum fölött az a. c. és d. c. vezetőképesség a mérési hibán belül egyezik.

A megfigyelt alacsony hőmérsékletű dielektromos állandók anomálishan nagyok, a hőmérséklet növelésével gyorsan növekednek. Mindez nem egyeztethető össze egy félvezető sávmodellel.

A vezetőképesség diszperziójának közvetlenül a maximum alatti megjelenése, a magasabban fekvő nagy vezetőképességet adó elektronállapotok (gyenge) lokalizáltságát mutatják. Mivel ezekben az anyagokban a rendezetlenség a két komponensű ötvözetmodell 50%-os összetételének felel meg (a donor molekulák a két lehetséges orientáció egyenlő valószínűséggel veszik fel és az NMeQn(TCNQ)<sub>2</sub> acetonitril tartalma 50%/mol körül van), a 1,4/b ábrán [31] látható állapotsűrűség és lokalizációs hosszeloszlás áll közel a valósághoz. A lokalizációs hosszak az energia függvényében itt látható sima változása magyarázza az éles mobilitás gap hiányát [6, 50]. Ugyanakkor az állapotok sávon belüli erősebb lokalizáltsága magyarázza a frekvenciafüggés jelenlétét magasabb hőmérsékleten és nagyobb d. c. vezetésnél is.

A tulajdonságok kvantitatív megértéséhez legközelebb a 2.2 fejezetben említett Gogolin, Melnikov, Rasba-elmélet visz [12]. Ez az elmélet a rendezetlenség hatására lokalizált elektronrendszer fononokkal való kölcsönhatását figyelembe véve képes a vezetőképesség hőmérséklet-függésének kvantitatív, a diszperzió kvalitatív és dielektromos állandó nagyságának magyarázatára (2.1 és 2.2 ábra). Mint az a 2.2 ábrán is látható, a dielektromos állandó hőmérséklet függése kvalitatíve is eltér a számolttól, az elmélet nem tükrözi  $\epsilon'$  csökkenését alacsony hőmérsékleten.

Az elmélettől való eltérés lehetséges oka véleményünk szerint az előzőekben diszkutált rendezetlenséget nem tartalmazó anyagok tulajdonságaiból vonható le [10, 53]. Az NMeQn(TCNQ)<sub>2</sub> B fázisa és a 4—4' BIP(TCNQ)<sub>2</sub> a három belső rendezetlenséget tartalmazó anyag közül kettőnek a rendezetlenséget nem tartalmazó változata. Rendezetlenség hiányában ezeknek az anyagoknak a gerjesztési spektrumában éles gap van, mely általában a speciális szerkezetnek és az erős elektron—elektron kölcsönhatásának köszönhető. A lokalizáción alapuló Gogolin, Melnikov, Rasba-elmélet ezeket a kölcsönhatásokat nem veszi figyelembe, az elektronrendszert egy  $1/4$ -ig betöltött lokalizált állapotból álló „sávval” írja le. Ugyanakkor valószínűleg a rendezetlenséget nem tartalmazó anyagokban tapasztalt a korrelációk által okozott gap nem teljesen tűnik el a belső rendezetlenséget tartalmazó anyagokban, csak elmosódik egy pszeudó-gap-é [6]. Egy ilyen kép megengedi az elektronok különböző lokalizáltságú állapotokba való gerjesztését és a dielektromos állandó szempontjából közelíti a 2.2 fejezetben említett Van Vleck-féle képhez. Ez a dielektromos állandó megfigyelt csökkenését eredményezheti alacsony hőmérsékleten.

## 7. Összefoglalás

A megépített  $10^{10}$  Hz-en működő mikrohullámú ellenállás és dielektromos állandó mérőberendezés felbontó képessége az ismert legjobbakéval azonos, rezonancia shiftben  $10^{-6}$ , felérték szélességben  $10^{-7}$ . Néhány esetben  $2 \cdot 10^{-7}$ -es, illetve  $2 \cdot 10^{-8}$ -as felbontást is sikerült elérnünk.



A mért szobahőmérsékleti vezetőképességek abszolút értéke megerősítette az egyenáramú vezetőképesség-mérések eredményeit.

A különböző belső rendezetlenséget tartalmazó és nem tartalmazó szerves sókon végzett mérésekből, az egyenáramú és mikrohullámú vezetőképességnek egymástól eltérő hőmérséklet-függéséből s a mért dielektromos állandókból, a lokalizált és kiterjedt elektronállapotok szerepéről kapunk felvilágosítást.

*Belső rendezetlenséget nem tartalmazó anyagokra* a példaként a 4—4' BIP(TCNQ)<sub>2</sub>-t és az NMeQn(TCNQ)<sub>2</sub> B fázisát [28] vizsgáltuk. Az utóbbinak az ellenállása túl nagy volt ahhoz, hogy hőmérséklet-függését meg tudjuk mérni. Hangsúlyozni kívánjuk azonban, hogy az egyenáramú és mikrohullámú vezetőképesség abszolút értékének egyezése az egyik fontos evidencia arra, hogy az NMeQn(TCNQ)<sub>2</sub> B fázisának rossz vezetése nem az anyag bomlásával kapcsolatos.

A 4—4' BIP(TCNQ)<sub>2</sub> esetében magas hőmérsékleten (> 100 K) a mikrohullámú és az egyenáramú vezetőképesség durván egyezik, míg alacsony hőmérsékleten (< 50 K) éles különbséget mutat. Ez a viselkedés *jellegében* hasonlít egyes amorf félvezetőkön megfigyeltekre.

Az, hogy az átmenet a két tartomány között viszonylag éles, és hogy a mikrohullámú ellenállás két aktiválási energiával fittelhető (magas hőmérsékleten  $\Delta E_{ac} \cong \Delta E_{dc} \cong 0,08$  eV, alacsony hőmérsékleten  $\Delta E_{ac} \cong 0,002$  eV) egy éles mobilitás gapre utal.

Az egyenáramú vezetőképesség-mérés az egyrészecske-gerjesztésekben határozott gapet mutat. 100 K fölött az a. c. és d. c. vezetőképesség egyezését a gap feletti kiterjedt állapotok domináns szerepének tulajdoníthatjuk. Ez alatt az a. c. vezetőképességét a gap-en belül és a Fermi-felületnél levő kis számú lokalizált állapot járuléka-nak tekinthetjük. Ezzel összhangban van a megfigyelt kis aktiválási energia. A gap határainak gyenge elmosódását és a Fermi-felületnél véges állapotsűrűség lokalizált állapotokból való létrehozását éles mobilitás gappal együtt szennyezések vagy rácshibák okozta rendezetlenséggel magyarázhatjuk.

A viszonylag kis dielektromos állandó és annak gyenge hőmérséklet-függése összeegyeztethető egy olyan képpel, ahol kiterjedt és lokalizált állapotok kb. egyenlő súllyal játszanak szerepet. Csak kiterjedt állapotok létét feltételezve a dielektromos állandóból kb. 0,8 eV-os sáv szélességet kapnánk, ami durván a duplája annak, ami ezekben az anyagokban elfogadott.

*Belső rendezetlenséget tartalmazó anyagokra* a dolgozatban 3 példát vizsgáltunk, a Qn(TCNQ)<sub>2</sub>-ben [10,54] és a 2—2' BIP(TCNQ)<sub>2</sub>-ben a rendezetlenség forrása az aszimmetrikus molekulák véletlenszerű orientációja, míg az NMeQn(TCNQ)<sub>2</sub> [28, 46] A fázisában a láncok közé véletlenszerűen beépült oldószer-molekulák.

Az a. c. és d. c. vezetőképességnek a hőmérséklet-függvényében való szétválása a 4—4' BiP(TCNQ)<sub>2</sub> esetében leírttól határozottan eltér. A szétválás közvetlenül a maximumnál kezdődik, és folytonosan következik be. Sem az a. c., sem a d. c. vezetőképesség nem írható le 1 vagy 2 aktiválási energiával. Ez az éles mobilitás gap hiányára mutat. A jellegzetes szétválás, a vezetőképességnek  $\lg \sigma - 1/T$  skálán való görbülete, alacsony hőmérsékleten a nagy dielektromos állandó és annak hőmérséklettel való gyors növekedése az anyagcsalád jellemzője.

Magas hőmérsékleten a maximum felett a vezetőképességnek nincs frekvencia-függése. Itt valószínűleg az ellenállást alapvetően nem a lokalizált állapotok közötti hopping, hanem más mechanizmus szabja meg.



Kísérletileg nem tudjuk megkülönböztetni azt, hogy az összes állapot (ha csak gyengén is, de) lokalizált, vagy vannak kiterjedt állapotok is a Fermi-felülettől messzebb.

Az 1 d rendezetlenség hatására létrejövő lokalizáción és elektron—fonon kölcsönhatáson alapuló elméletekkel [12] a kísérleti eredményeket összehasonlítva a következőket mondhatjuk:

a) d. c. vezetőképesség — ha csak kvalitatíve is — de összeegyeztethető az elméletekkel.

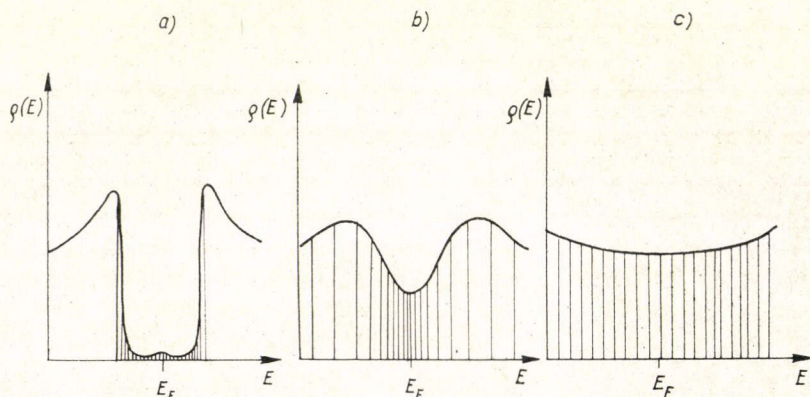
b) A vezetőképesség frekvencia-függése az elméletekben nincs kvantitatíve kidolgozva, kvalitatíve az elmélet összhangban van a tapasztalattal.

c) A dielektromos tényező hőmérséklet-függése különbözik jellegében is a számoltól. (2.2 ábra.)

Az elmélet és kísérlet közötti diszkrepancia oka lehet a korrelációs effektusok figyelmen kívül hagyása.

Mindezek alapján a következő általános kép alakítható ki:

Azokban az anyagokban, ahol nincs belső rendezetlenség, éles gap figyelhető meg a vezetőképesség mérésekben: ez az 1 d instabilitások és korrelációs effektusok következménye. Szennyezések, rácshibák okozhatnak kis elkentséget és véges állapotsűrűséget a gapben (7.1/a ábra). Felnövelve a rendezetlen potenciál nagyságát, és sűrűségét, a gap egyre jobban elmosódik, az állapotok lokalizálttá válnak, a 7.1/a ábra mutatja azt a helyzetet, ahol a véletlenszerű potenciál nagysága a gappal összemérhető, majd végül a gap teljesen eltűnik (7.1/c ábra). Ez utóbbi 7.1/c ábra felelne meg az említett lokalizáción alapuló elméleteknek, a 7.1/b ábra a 4—4' BIP(TCNQ)<sub>2</sub>-nek. Minden jel arra mutat, hogy a vizsgált belső rendezetlenséget tartalmazó anyagokra a megfelelő kép a 7.1/b ábrán látható lenne. A rendezetlenségnek és a lokalizációnak ebben már döntő szerepe van, de a rendszer még „emlékszik” a rendezetlenség nélküli gapre. A kísérleti eredményekkel való jobb egyezés csak ennek figyelembevétele után várható.



7.1 ábra. 1 d elektronrendszer különböző lehetséges állapotsűrűségei.

- a) sáv-félfezető ritka rendezetlenséggel (szennyezések, rácshibák),
- b) félvezető erős rendezetlenséggel (belső rendezetlenség),
- c) csak belső rendezetlenség korrelációk nélkül  
(a vonalkázás az állapotok különböző lokalizáltságát jelzi)



Ilyen modellek az amorf félvezetőkre, 3 d-ban meglehetősen részletesen kidolgozottak. A vizsgált rendszerek kvázi egydimenzióssága a probléma elméleti tárgyalását erősen megnehezíti. Napjainkban mind az elméleti, mind a kísérleti vizsgálatok intenzíven folytatódnak. Remélhető, hogy ez az erőfeszítés az anyagok viselkedésének pontosabb megértéséhez fog vezetni. Hasonlóan, mint az amorf félvezetőkre kidolgozott elméletek alapján, várható, hogy az elméleti modellek részletesebb kidolgozása után a kísérletek alapján lehetőség lesz olyan kérdések kvantitatív megválaszolására is, mint pl. az állapotsűrűség a Fermi-felületnél, lokalizáció mértéke stb., melyekre jelenleg nincs lehetőség.

### KÖSZÖNETNYILVÁNÍTÁS

Szeretném megköszönni Pál Lénárd akadémikusnak, a KFKI főigazgatójának, Vasvári Béla és Tompa Kálmán igazgatóknak, hogy lehetőséget adtak a dolgozat elkészítésére.

Köszönetemet szeretném kifejezni témavezetőmnek Kósa-Somogyi Istvánnak állandó érdeklődéséért, s a kedvező munkakörülmények megteremtéséért.

Munkámat Grüner György által vezetett csoporton belül végeztem, fő feladatomban a dolgozatban leírt berendezés megépítése, s azzal mérések végzése volt. Ez a csoport többi tagjának munkája nélkül lehetetlen lett volna, hiszen az anyagokat nem én szintetizáltam, analizáltam stb. Ugyanakkor eredményeim a csoport többi tagjainak eredményeivel együtt kerültek értelmezésre és publikálásra, a közösen kialakított elképzelésekhez a csoport minden tagjának munkája hozzásegített. A csoport minden tagjának szeretném megköszönni munkám lehetővé tételét és a közös munkát.

Külön köszönöm Grüner Györgynek és Jánossy Andrásnak munkám irányítását, s mindazt amire megtanítottak, Mihály Györgynek az egyenáramú ellenállás mérések rendelkezésemre bocsátását, Sólyom Jenőnek a kézirat gondos elolvasását és hasznos tanácsait.

Hargitay Csabának, Kamarás Katalinnak, Kemény Tamásnak, Mihály Lászlónak, Sólyom Jenőnek, Zawadowski Alfrédnek és Woynarowich Ferencnek a velük folytatott hasznos beszélgetésekért, Nagy Sándornak és Anthonighel Tibornak a mechanikus munkák elvégzéséért, Zentai Györgynek, Horváth Péternek és Bánki Péternek az elektronikus problémák megoldásában nyújtott segítségért, Morassi Zsuzsának az ábrák egy részének gondos elkészítéséért mondok köszönetet.

### IRODALOM

1. I. F. Segolev, Phys. Stat. Sol. 12, 9, 1972.
2. L. I. Buravov, I. F. Segolev, Prib. i Tekh. Eksper. 4 171, 1971.
3. R. E. Peierls: Quantum Theory of Solids. Oxford 1955.
4. N. Menyhard, J. Sólyom J. Low. Temp. Phys 12, 519, 1973.
5. N. F. Mott, W. D. Twose, Adv. Phys. 10, 107, 1961.
6. N. F. Mott és E. A. Davis: Electronic Processes in Non-crystalline Materials. Oxford 1971.
7. L. N. Bulaevski, R. B. Ljubowski és I. F. Segolev, Pisma ZSETF 16, 42, 1972.
8. L. N. Bulaevski, A. A. Gusseinov, O. N. Ereminko, V. N. Topnikov, I. F. Segolev, Fiz. Tverd Tela 17, 781, 1975.
9. A. A. Gogolin, S. P. Zolotukhin, V. I. Melnikov, E. E. I. Rasba, I. F. Segolev, Pisma ZSETF 22, 564, 1975.
10. K. Holczer, G. Mihály, A. Jánossy, G. Grüner, Mol. Cryst. Liq. Cryst. 32, 199, 1966.
11. L. J. Azevedo, Ph. D. tézisek.
12. A. A. Gogolin, V. I. Melnikov, E. I. Rasba, preprint.
13. G. Theodorou, M. H. Cohen, preprint.
14. J. B. Torrance and B. D. Silvermann, Preprint.
15. A. F. Garito, A. J. Heeger: Collective Properties of Physical Systems, Nobel Symposia 1973. Academic Press, 129. oldal.
16. A. N. Bloch, R. B. Weisman and C. M. Varma, Phys. Rev. Lett. 28, 753, 1972.
17. R. G. Kepler, J. Chem. Phys. 39, 3628, 1963.
18. M. J. Cohen, L. B. Coleman, A. F. Garito, A. J. Heeger, Phys. Rev. B. 10, 1298, 1974.
19. A. N. Bloch, D. O. Cowan, K. Bechgaard, R. E. Pyle, R. H. Bands and T. O. Pochler, Phys. Rev. Lett. 34, 1561, 1975.



20. L. B. Coleman, J. A. Cohen, A. F. Garito and A. J. Heeger, *Phys. Rev. B.* 7, 2122, 1973.
21. G. Mihály, K. Ritvay-Emandity and G. Grüner, *J. Phys. C* 8 L, 361, 1975.
22. Yu. A. Bychkov, L. P. Gorkov and I. E. Dzyaloshinsky *ZSETF* 50, 738, 1966.
23. L. Mihály, J. Sólyom, J. Low. *Temp. Phys.*
24. J. Hubbard, *Proc. of the Royal Society* 276, 238, 1963. E. H. Lieb and F. Y. Wu *Phys. Rev. Lett* 20, 1445, 1968. H. Shiba, *Phys. Rev. B.* 6, 930, 1972.  
G. Beni, P. Pincus, J. Kanamori, *Phys. Rev. B.* 10, 1936, 1974.  
U. Bernstein and P. Pincus *Phys. Rev. B.* 10, 3626, 1974.  
R. A. Bari, *Phys. Rev. B.* 3, 2662, 1971.
25. A. A. Ovchinnikov, *ZSETF* 64, 342, 1972.
26. K. Holczer, *KFKI* 75—37.
27. F. Woyrnarovich, L. Mihály, G. Grüner, *Solid State Commun.* 19, 1189, 1976.
28. G. Mihály, K. Holczer, G. Grüner and L. D. Kunstelj, *Solid State Commun* 19, 1091, 1976.
29. A. A. Gogolin, V. I. Melnikov, E. I. Rasba, Conference on the Organic Conductors and Semiconductors Siófok 1976. 265. oldal.
30. R. L. Agacy and R. E. Borland, *Proc. Phys. Soc.* 84, 320, 1964.
31. R. L. Bush, *Phys. Rev. B.* 6, 1182, 1972.
32. R. J. Elliott, J. A. Krumhansl, P. L. Leath, *Rev. Mod. Phys.* 46, 465, 1975.
33. J. M. Ziman: *Principles of the Theory of Solids.* Cambridge 1964.
34. S. K. Khanna, E. Ehrenfreund, A. F. Garito, A. J. Heeger, *Phys. Rev. B.* 10, 2205, 1974.
35. N. F. Mott, *Contemp. Phys.* 14, 401, 1973.  
N. F. Mott and Z. Zinoman, *Rep. Prog. Phys.* 33, 881, 1970.  
N. F. Mott: *Metal — Insulator Transitions* Oxford.
36. L. M. Falicov, J. C. Kinball, *Phys. Rev. Lett.* 22, 997, 1969.
37. A. N. Bloch, J. P. Ferraris, D. O. Cowan, T. O. Poehler, *Solid State Commun* 13, 753, 1973.
38. J. P. Ferraris, T. F. Finnegan, *Solid State Commun*, 18, 1169, 1976.
39. M. Cohen, S. K. Khanna, W. J. Gunning, A. F. Garito, A. J. Heeger, *Solid State Commun*, 17, 367, 1975.
40. K. Holczer, G. Mihály, K. Pintér, A. Jánossy, G. Grüner, W. G. Clark, Conference on the Organic Conductors and Semiconductors Siófok 1976. 507. oldal.
41. L. R. Melby, R. J. Harder, W. R. Hertler, W. Mahler, R. E. Benson and W. E. Mochel, *J. Amer. Chem. Soc.* 84, 3374, 1962.
42. F. Wudl, preprint.
43. J. Néel, P. Dupuis: *Quelques aspects de l'état solide organique.* Masson and C. 91. oldal.
44. H. Kobayashi, F. Marumo and Y. Saito, *Acta Cryst. B.* 27, 273, 1971.
45. S. Flandrois, P. Delhaes, J. C. Cintiini and P. Dupuis, *Phys. Lett.* 35A, 339, 1973.
46. G. Mihály, K. Holczer, K. Pintér, A. Jánossy and G. Grüner, *Solid State Commun.* 17, 1007, 1975.
47. G. J. Ashwell, D. D. Eley and M. R. Willis, preprint.
48. G. Mihály, G. Grüner, K. Holczer, A. Jánossy, *Solid State Commun.* 553. oldal.
49. G. Mihály, K. Holczer, G. Grüner, Conference on Organic Conductors and Semiconductors Siófok 1976 553. oldal.
50. E. N. Economou, M. H. Cohen, *Phys. Rev. Lett.* 24, 218, 1970.
51. L. N. Bulaevski, R. B. Ljubovszki, I. F. Segolev, *Pisma ZSETF* 16, 42, 172.
52. W. Dietrich, *Z. Physik* 270, 239, 1974.
53. G. Mihály, K. Ritvay-Emandity, G. Grüner, Conference on Organic, Conductors and Semiconductors Siófok 1976. 536. oldal.



Technikai szerkesztő Turchányi György  
A kiadásért felelős az Akadémiai Kiadó igazgatója — Műszaki szerkesztő: Salgó István  
A kézirat beérkezett: 1977. IV. 20. — Terjedelem: 8,4 (A/5) iv  
77-1933 — Szegedi Nyomda — F. v.: Dobó József







A MAGYAR  
TUDOMÁNYOS AKADÉMIA  
MATEMATIKAI ÉS FIZIKAI TUDOMÁNYOK  
OSZTÁLYÁNAK

# KÖZLEMÉNYEI

Matematikai, fizikai, csillagászati dolgozatokat, referátumokat, könyvismertetéseket, a Tudományos Minősítő Bizottságnak a III. Osztályra vonatkozó híreit s a III. Osztály híreit közli. Évenként egy kötet (kb. 40 ív) jelenik meg (négy szám alkot egy kötetet).

A Közlemények előfizetési ára kötetenként, azaz évenként 60 Ft. Belföldi megrendelések az Akadémiai Kiadó, 1363 Budapest V., Alkotmány u. 21. (pénzforgalmi jelzőszámunk 215-11 488), külföldi megrendelések a „Kultúra”

Könyv- és Hírlap Külkereskedelmi Vállalat,  
1011 Budapest I., Fő utca 32.

(pénzforgalmi jelzőszám: 218-10 990) útján eszközölhetők.



Ára: 10,— Ft  
Előfizetés kötetenként: 48,— Ft

INDEX: 26491 ISSN 0025—0104
--------------------------------

## TARTALOMJEGYZÉK

<i>Balogh Gy. Ádám:</i> Pozitron annihiláció ionkristályokban .....	285
<i>Holzer Károly:</i> Szerves kvázi egydimenziós anyagok mikrohullámú vezetőképességének és dielektromos tényezőjének vizsgálata .....	341



307.226

14

# MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

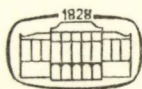
A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA  
III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

KOVÁCS ISTVÁN, NAGY ELEMÉR,  
PÁL LÉNÁRD ÉS SZALAY SÁNDOR  
KÖZREMŰKÖDÉSÉVEL

SZERKESZTI  
JÁNOSSY LAJOS

XXV. KÖTET

5. FÜZET



AKADÉMIAI KIADÓ  
MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA  
BUDAPEST 1977



# MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

## A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

KIADÓHIVATAL: 1363 BUDAPEST V., ALKOTMÁNY UTCA 21. SZ.

A Magyar Fizikai Folyóirat a magyar fizikus kutatók lapja. A lap célja a magyar fizikai kutatás korszerű szinten való támogatása, elsősorban összefoglaló jellegű cikkek, tanulmányok stb. közlése által. Ilyen dolgozatok megjelentetésével a lap tájékoztatást kíván nyújtani a fizika különböző kutatási területeinek jelenlegi eredményeiről, problémáiról, további célkitűzéseiről. A lap „A klaszszikus irodalomból” című rovatában rendszeresen közöl egy-egy téma köré csoportosított, immár klasszikussá vált cikkeket, amelyek a témakör befejezése, átlagosan 10–10 dolgozat megjelenése után a folyóiratfüzetekről leválasztva, az alsó lapszámozás szerint összekötve, önálló köteteket képeznek. A folyóiratról évenként egy kötet jelenik meg hat füzetben, füzetenként átlag 6 ív terjedelemben.

A kéziratok a következő címre küldendők:

Jánossy Lajos akadémikus  
1121 Budapest XII., Konkoly Thege út  
Központi Fizikai Kutató Intézet

Ugyanerre a címre küldendő minden szerkesztőségi levelezés.

A közlésre el nem fogadott kéziratokat a szerkesztőség lehetőleg visszajuttatja a szerzőkhöz, de felelősséget a beküldött, el nem fogadott kéziratok megőrzéséért vagy továbbításáért nem vállal.

A folyóirat előfizetési ára kötetenként 48 Ft. Belföldi megrendelések az Akadémiai Kiadó, 1363 Budapest V., Alkotmány utca 21. (pénzforgalmi jelzőszámunk 215-11 488), külföldi megrendelések a „Kultúra” Könyv- és Hírlap Külkereskedelmi Vállalat, 1389 Budapest I., Fő utca 32. (pénzforgalmi jelzőszám: 218-10 990) útján eszközölhetők.

A kéziratokkal kapcsolatban a szerkesztőség a következőket kéri a szerzőktől:

1. A dolgozat elé rövid tartalmú ismertetőt írjanak.
2. A levezetéseknek csak a gondolatmenetét és főbb lépéseit közöljék. Ha részletezésre lesz szükség, a szerkesztőség azt külön fogja kérni.
3. A kéziratokat gépelve, egy oldalra írva, 4 cm-es margóval, kettős sorközzel készítsék el.
4. Az ábrákat ceruzával, sima fehér papírra rajzolják. A nyomda számára a rajzok elkészítését a Kiadó vállalja.
5. Az ábrák alá rövid magyarázószöveget írjanak.
6. A kéziratban az érvényben levő kiadói előírások szerint adjanak szedési útmutatásokat.
7. A szövegben az irodalmi utalásokat szögletes zárójelbe tegyék. Az irodalmi adatok megadásakor a folyóiratban kialakult formát használják.



# TRANSPORTFOLYAMATOK LEÍRÁSA A RELATIVISZTIKUS KONTINUUMFIZIKÁBAN

TAKÁCS CSABA

Nehézipari Műszaki Egyetem, Fizikai Tanszék, Miskolc

## Tartalmi ismertető

A dolgozat a kontinuumok transzportegyenleteinek relativisztikus általánosításával és a transzportfolyamatok leírásában használt mennyiségek transzformációs törvényeivel foglalkozik, majd az általános eredményeket a folyadékmechanika és a magnetohidrodinamika egyszerűbb közegeire alkalmazza.

## Bevezetés

Ha a kontinuum makroszkopikus sebessége vagy részecskéi mikroszkopikus mozgásának a sebessége a vákuumbeli fénysebességhez közelít, illetve ha az áramlás erős gravitációs térben zajlik le, a fizikai folyamatok leírásának relativisztikus módját kell választanunk.

A relativisztikus kontinuumfizikában már a relativitáselmélet megalkotását követő években is születtek ugyan eredmények [1, 2], de a kutatások homlokterében a fizika más fejezetei álltak: azok, amelyekben kilátás volt relativisztikus effektusok megfigyelésére (elektrodinamika, pontmechanika, gravitációs elmélet). A negyvenes évek vége óta azonban fokozatosan nő az érdeklődés a kontinuumfizika relativisztikus általánosítása iránt. Ebben nagy szerepet játszik az a körülmény, hogy a relativisztikus hidrodinamika a magfizikában és az asztrofizikában alkalmazásra talált [1, 3, 4, 5]. Az utóbbi tíz esztendőben számos kutató foglalkozott a kontinuumok relativisztikus konstitutív elméletének kiépítésével, illetve a magnetohidrodinamika relativisztikus általánosításával. Dolgozatunk elsősorban *Grot* és *Eringen* [6] munkájára és *Lichnerowicz* [7] könyvére támaszkodik.

## Jelölések

Szimbolikus alak használatakor a hármas vektorok betűjele fölé nyilat helyezünk, a másodrendű hármas tenzor betűje fölé  $\wedge$  jelet írunk. Indexes írásmódban követni fogjuk az összegzési konvenciót; a latin betűs indexek értéke 1, 2, 3 vagy 4, a görög betűsöké pedig 1, 2 vagy 3 lehet.

A  $\Phi_{ik}$  mátrix determinánsát  $|\Phi_{ik}|$  jelöli,  $\delta_{ik}(\delta_i^k)$  a Kronecker-szimbólum,  $e_{i\alpha\lambda}$  a hármas,  $e_{iklm}(e^{iklm})$  a négyes permutációs objektum,  $i = (-1)^{1/2}$ . Szimbolikus írásmódban a skaláris szorzást a mennyiségek betűjelenek egymás mellé írásával, a diadikus szorzást pedig a betűk közé írt  $\circ$ -rel jelöljük.



## I. KINEMATIKA

## 1. Speciális elmélet

A speciális elméletben a  $(z_x, z_4)$  Minkowski-koordinátákat használjuk;  $z_1, z_2$  és  $z_3$  a (Descartes-féle) térkoordináták,  $z_4 = ict$  ( $c$  a vákuumbeli fénysebesség inerciarendszerben,  $t$  az idő).

A kontinuum pontjainak „elnevezésére” vegyük föl az  $\mathcal{R}$  inerciarendszert, s legyenek  $\mathcal{R}$ -ben a kontinuum tetszőleges  $P$  pontjának térkoordinátái a zérus időpillanatban  $Z_1, Z_2$  és  $Z_3$ ; ezeket a mennyiségeket  $P$  referenciakordinátáinak fogjuk nevezni. A kontinuum pontjainak  $\mathcal{B}$  halmaza a  $Z_x$  számhármassok  $\mathcal{Z}$  halmazára kölcsönösen egyértelműen leképezhető.

Tekintsük most az  $\mathcal{I}$  inerciarendszert. Ebben  $P$  térkoordinátái a  $t = z_4/ic$  időpontban legyenek  $z_1, z_2$  és  $z_3$ . A  $z_x = f_x(Z_\lambda, z_4)$ ,  $Z_\lambda \in \mathcal{Z}$  függvények leírják a kontinuum mozgását  $\mathcal{I}$ -ben. A  $z_4$  paraméter rögzített értéke mellett a  $z_x$  számhármassok halmaza egy-egyértelműen leképezhető  $\mathcal{Z}$ -re, előállíthatók a  $Z_i = F_i(z_k)$  egyértékű inverz függvények. Vezessük be a  $\partial\Phi/\partial z_r = \Phi_{,r}$  és a  $\partial f_x/\partial Z_\lambda = z_{x\lambda}$  jelölést ( $\Phi(z_k)$  tetszőleges deriválható mennyiségtér). Akkor — szinguláris felületektől, vonalaktól és pontoktól eltekintve — fennállnak a  $|z_{x\lambda}| = J \neq 0$ ,  $|Z_{i,x}| = J^{-1}$  összefüggések.

A  $P$  kontinuumpont sebessége  $\mathcal{I}$ -ben  $v_x = ic\partial f_x/\partial z_4$ . A referenciakordináták helyébe  $F_\lambda(z_r)$ -t írva előállíthatjuk a  $v_x = v_x(z_r)$  sebességteret.

A kontinuumnak a téridő  $z_r$  pontjához tartozó sajátrendszerén (vagy a  $P$  kontinuumponthoz és a  $t$  időpillanathoz kapcsolódó sajátrendszeren) olyan inerciarendszert értünk, amelynek sebessége  $\mathcal{I}$ -hez képest  $v_x(z_r)$ . Megállapodunk abban, hogy ha egy egyenletlanc valamely helyén az egyenlőségjel fölé 0-t írunk, a lánc további része a sajátrendszerre vonatkozik.

Tekintsük a kontinuum  $P$  pontjához és a  $t$  időpillanathoz tartozó  $\mathcal{S}$  sajátrendszert, ez a  $(t, t+dt)$  intervallumban első közelítésben sajátrendszere marad  $P$ -nek.  $\mathcal{S}$ -ben az intervallum hossza  $d\tau = dt/\gamma$ ,  $\gamma = (1 - v_0 v_0/c^2)^{-1/2}$  (idődilatáció).  $P$ -re vonatkozóan  $\gamma = \gamma(t)$ . A  $\tau = \int_0^t \gamma^{-1}(t') dt'$  skaláris mennyiséget  $P$  sajátidejének hívjuk.

Legyen  $P$  elmozdulása  $\mathcal{I}$ -ben az említett időintervallumban  $dz_i$ . Az  $u_i = dz_i/d\tau$  vektor neve: négyes sebesség. Nyilván  $u_i = \gamma(v_i, ic)$ ,  $u_i^0 = 0$ ,  $u_4^0 = ic$ . Könnyen belátható, hogy

$$u_k u_k = -c^2. \quad (1)$$

A  $\Phi(z_k)$  mennyiség materiális deriváltján a  $D\Phi = d\Phi/d\tau = u_k \Phi_{,k}$  mennyiséget fogjuk érteni. A négyes sebesség materiális deriváltját négyes gyorsulásnak nevezzük, jele  $\alpha$ . (1) következményeképpen

$$u_k \alpha_k = 0. \quad (2)$$

Bevezetjük a  $P_{ik} = \delta_{ik} + u_i u_k/c^2$  szimmetrikus tenzort. Rögtön adódik, hogy  $P_{ix}^0 = \delta_{ix}$ ,  $P_{i4} = P_{4i} = P_{44}^0 = 0$ , továbbá

$$P_{ik} u_k = 0, \quad (3)$$

$$P_{ir} P_{rk} = P_{ik}. \quad (4)$$

Ez utóbbi tulajdonsága alapján  $P$ -t projektornak nevezzük.



Legyen  $f_i(z_k)$  vektortér. Bontsuk föl  $\mathbf{f}$ -et a négyes sebességgel paralel és arra ortogonális komponensekre:

$$f_i = f_i^{\parallel} + f_i^{\perp},$$

$$f_i^{\parallel} u_k = f_k^{\parallel} u_i,$$

$$f_k^{\perp} u_k = 0.$$

A második egyenletet  $u_k$ -val átszorozva, majd figyelembe véve a másik két összefüggést és (1)-et, a következő kifejezéseket nyerjük:

$$f_i^{\parallel} = -(1/c^2)(f_k u_k) u_i, \quad (5a)$$

$$f_i^{\perp} = P_{ik} f_k. \quad (5b)$$

térszerűnek

Az  $\mathbf{f}$  vektort null-vektornak mondjuk, ha  $f_k f_k \cong 0$ .

időszerűnek

Mivel  $u_i$  időszzerű,  $f_i^{\parallel}$  csak időszzerű vagy null-vektor lehet;  $f_i^{\perp}$  pedig térszerű vagy null-vektor, hiszen

$$0 = f_i^{\perp} u_i \stackrel{0}{=} i c f_4^{\perp},$$

$$f_k^{\perp} f_k^{\perp} \stackrel{0}{=} f_{\alpha}^{\perp} f_{\alpha}^{\perp} \cong 0.$$

A kontinuum deformációinak sebességét a hagyományos mechanikában a  $v_{(i, \alpha)} \equiv (1/2)(v_{i, \alpha} + v_{\alpha, i})$  objektummal írjuk le. E mintát követve azt gondolhatnók, hogy a relativisztikus kinematika deformációsebességi tenzora  $u_{(i, k)}$ . Vegyük azonban tekintetbe, hogy a  $v_{(i, \alpha)} \stackrel{0}{=} 0$  esetben — amikor helyileg és pillanatnyilag minden deformációsebesség zérus —  $u_{(i, k)}$  általában nem tűnik el. Az (1)-ből nyerhető

$$u_k u_{k, i} = 0 \quad (6)$$

összefüggés szerint  $u_{4, i} \stackrel{0}{=} 0$ , így  $u_{(i, 4)} \stackrel{0}{=} (1/2) i c \partial v_i / \partial t$ .

Rögtön látható viszont, hogy a

$$d_{ik} = P_{(kr} u_{i), r} = u_{(i, k)} + \alpha_{(i} u_{k)}/c^2$$

tenzor már megfelel, hiszen

$$d_{i\alpha} \stackrel{0}{=} v_{(i, \alpha)}$$

és

$$d_{i4} \stackrel{0}{=} 0.$$

Vezessük be a  $d_{rr} = \Theta$  jelölést. (2) miatt  $\Theta = u_{r, r} \stackrel{0}{=} \text{div } \vec{v}$ , azaz  $\mathbf{d}$  spurja a térfogati dilatáció sebességét adja a sajátrendszerben. A (3) és (6) segítségével nyerhető

$$d_{ik} u_k = 0 \quad (7)$$

azonosságból rögtön következik, hogy

$$P_{rs} d_{rs} = \Theta. \quad (8)$$

A  $P_{kr} u_{i, r}$  tenzor ferdeszimmetrikus részét, az

$$\omega_{ik} = u_{[i, k]} + \alpha_{[i} u_{k]}/c^2$$



objektumot, amely a kontinuum lokális merev forgásának sebességét adja meg, örvénytenzornak fogjuk nevezni. Nyilván  $\omega_{ik}u_k=0$ .

Az  $\mathbf{a}$  és  $\mathbf{b}$  vektortér  $\mathbf{c}=\mathbf{a}\times\mathbf{b}$  vektori szorzatát a

$$c_i = \varepsilon_{ikr} a_k b_r, \quad \varepsilon_{ikr} = (1/i) \varepsilon_{ikrs} u_s / c$$

módon definiáljuk ( $\mathbf{c}$  pszeudovektor). A sajátrendszerben  $c_i = \varepsilon_{ixq} a_x b_q$  és  $c_4=0$ . Ha  $\mathbf{f}$  az  $f_{ik}u_k=0$  feltételt teljesítő ferdeszimmetrikus tenzor, akkor van vektorinvariánsa, azaz található hozzá olyan  $\mathbf{f}$  pszeudovektor, melyre

$$\mathbf{f}\mathbf{a} = \mathbf{f}\times\mathbf{a};$$

itt  $\mathbf{a}$  tetszőleges vektor. Megmutatható, hogy

$$f_i = (-1/2) \varepsilon_{ikr} f_{kr}.$$

Az örvénytenzor vektorinvariánsa:

$$\boldsymbol{\omega} = (1/2) \mathbf{V}\times\mathbf{u};$$

$\mathbf{V}$  a  $\partial/\partial z_i$  vektoroperátor szimbóluma. A sajátrendszerben  $\omega_i = (1/2)(\text{rot } \tilde{v})_i$ , tehát  $\omega_i$  a lokális merev forgás szögsebessége.

## 2. Általános elmélet

Ha a kontinuum mozgását a  $\mathcal{C}$  nem inerciális vonatkoztatási rendszerben írjuk le (pl. azért, mert a számottevő permanens gravitációs tér miatt inerciarendszer nem is található), akkor a téridő pontjainak megadására az  $x^i$  görbevonalú térkoordinátákat és a  $x^4=ct$  koordinátát használjuk, s a Minkowski-féle pszeudo-euklidészi geometria helyébe a Riemann-geometria lép. Ilyenkor is tartoznak azonban a téridő minden  $Q(x^i)$  pontjához olyan vonatkoztatási rendszerek, melyekben  $Q$  elemi környezetében érvényesek a speciális elmélet törvényei. Ezeket a rendszereket a  $Q$  négyes ponthoz tartozó geodetikus rendszereknek ( $\mathcal{G}_Q$ ) fogjuk nevezni.

Használjunk  $\mathcal{G}_Q$ -ban olyan  $X^i, cT$  koordinátákat, hogy  $Q$  környezetében  $X^i, icT$  Minkowski-koordinátákba menjenek át. Mivel az egyes  $\mathcal{G}_Q$  rendszerek között a transzformáció  $Q$  körül Lorentz-féle, a  $ds^2 = dX^i dX^i - c^2 dT^2$   $Q$ -beli ívelemnégyzet skalár. Bevezetve a  $\gamma_{ix} = \delta_{ix}$ ,  $\gamma_{i4} = \gamma_{4i} = 0$ ,  $\gamma_{44} = -1$  objektumot, írható, hogy  $ds^2 = \gamma_{ik} dX^i dX^k$ .

Az ívelemnégyzet azonban  $\mathcal{C}$  koordináta-differenciáljaival is kifejezhető. Legyen  $\partial X^i(x^r)/\partial x^k$  a  $Q$  pontban  $A_k^i$ , akkor

$$ds^2 = \gamma_{ik} A_r^i A_s^k dx^r dx^s. \quad (9)$$

A

$$g_{rs} = \gamma_{ik} A_r^i A_s^k \quad (10)$$

objektum (amely természetesen  $x^i$  függvénye) a  $\mathcal{C}$ -beli metrikus tenzor.

Ha a  $Q(x^i)$ -beli  $\mathcal{G}$  geodetikus rendszernek az az  $X^i$  térpontja, amely  $x^i$ -vel az  $x^4/c$  időpontban egybeesik,  $\mathcal{C}$ -ben ekkor momentán nyugalomban van, akkor  $\mathcal{G}$  sajátrendszere  $\mathcal{C}$ -nek  $x^i$ -ben. Ilyenkor  $x^i$   $\mathcal{G}$ -beli elmozdulása az  $(x^4, x^4 + dx^4)$  intervallumban  $dX^i = A_4^i dx^4 = 0$ , tehát  $A_4^i$  eltűnik.



Tekintsük a  $\mathcal{C}$  rendszer  $x^i$  és  $x^i + dx^i$  pontját, s legyen  $\mathcal{S}$  az  $x^4/c$  pillanatban sajátrendszer  $Q(x^i)$ -re nézve.  $Q$  koordinátáit  $\mathcal{S}$ -ben jelölje  $X^i$  és  $cT$ , akkor az  $x^i + dx^i$  térpont koordinátái a  $T$  pillanatban  $X^i + A^i_\lambda dx^\lambda$  (hiszen  $A^i_4 = 0$ ). A  $\mathcal{C}$  rendszer két közeli pontjának  $\mathcal{S}$ -beli távolsága tehát

$$d\sigma = (A^i_\lambda A^i_\mu dx^\lambda dx^\mu)^{1/2}. \quad (11)$$

(10)-ből

$$g_{\lambda\mu} = A^i_\lambda A^i_\mu - A^4_\lambda A^4_\mu \quad (12)$$

és —  $A^i_4 = 0$  figyelembevételével —

$$g_{\lambda 4} = -A^i_\lambda A^i_4, \quad g_{44} = -(A^i_4)^2. \quad (13)$$

(12)-t és (13)-at felhasználva az

$$A^i_\lambda A^i_\mu = g_{\lambda\mu} - g_{\lambda 4} g_{\mu 4} / g_{44}$$

összefüggést kapjuk; ezt (11)-be beírva végül a

$$d\sigma^2 = (g_{\lambda\mu} - g_{\lambda 4} g_{\mu 4} / g_{44}) dx^\lambda dx^\mu \quad (14)$$

kifejezés adódik. A  $d\sigma$  mennyiséget tekintjük a két közeli pont távolságának az  $x^4/c$  időpillanatban. A hármas sebesség négyzetét (14)-re támaszkodva a következőképpen értelmezzük:

$$v^2 = (d\sigma/dx^4)^2 c^2 = (g_{\lambda\mu} - g_{\lambda 4} g_{\mu 4} / g_{44}) v^\lambda v^\mu; \quad (15)$$

itt  $v^\lambda = (dx^\lambda/dx^4) c$ .

Ha a  $Q(x^i)$ -beli  $\mathcal{Q}$  geodetikus rendszerben a kontinuumnak az a  $P$  pontja, amely az  $x^4/c$  időpontban az  $x^i$  helyen van, pillanatnyilag áll, akkor  $\mathcal{Q}$  sajátrendszere a kontinuumnak  $Q$ -ra vonatkozóan. A  $P$  materiális ponthoz és az  $(x^4, x^4 + dx^4)$  intervallumhoz kapcsolódó ívelemnégyszet  $\mathcal{Q}$ -ben kifejezve

$$ds^2 = -c^2 d\tau^2 \quad (16)$$

( $d\tau$  a sajátidő-elem).  $\mathcal{C}$  adataival viszont — tekintettel  $g$  szimmetriájára és (15)-re —

$$ds^2 = \{v^2 + c^2 g_{44} [1 + (g_{i4}/g_{44})(v^i/c)]^2\} dt^2. \quad (17)$$

(16) és (17) összehasonlításából a

$$dt = \Gamma d\tau,$$

$$\Gamma = \{(-g_{44})[1 + (g_{i4}/g_{44})(v^i/c)]^2 - v^2/c^2\}^{-1/2} \quad (18)$$

összefüggés adódik a rendszeridő és a sajátidő eleme között. Ha  $\mathcal{C}$  inerciális, akkor  $g_{i4} = 0$  és  $g_{44} = -1$ , tehát visszakapjuk a speciális elmélet

$$dt = (1 - v^2/c^2)^{-1/2} d\tau$$

idődilatációs képletét.

Az  $u^i = dx^i/d\tau$  négyes sebességvektor komponensei (18) felhasználásával így írhatók:

$$u^i = \Gamma v^i, \quad u^4 = \Gamma c. \quad (19)$$

A  $\delta_{ik}$  objektum helyébe az általános elméletben  $g_{ik}$  lép, tehát  $P_{ik} = g_{ik} + u_i u_k / c^2$ .



Legyen  $\Phi$  skalártér,  $\Phi^i$  pedig vektortér. A  $\partial\Phi/\partial x^i = \Phi_{,i}$  deriváltak négyes vektort alkotnak, a  $\Phi^i_{,k}$  mennyiségekből felépülő objektum azonban nem tenzor. Viszont — mint a Riemann-geometriából ismeretes —

$$\Phi^i_{;k} = \Phi^i_{,k} + \Phi^l \Gamma_{kl}^i \quad (20)$$

már tenzormennyiség; itt

$$\Gamma_{kl}^i = g^{im} \Gamma_{klm}, \quad \Gamma_{klm} = (1/2)(-g_{kl,m} + g_{lm,k} + g_{mk,l}) \quad (21)$$

és  $g^{im}$  a  $g_{mn}$  objektum inverze:  $g^{im}g_{mn} = \delta_n^i$ . A  $\Phi^i_{;k}$  tenzor  $\Phi^i$  kovariáns deriváltja. Tiszta kovariáns komponensei a  $\Phi_l = g_{lm} \Phi^m$  vektorkomponensekkel könnyen kifejezhetők:

$$\Phi_{i;k} = g_{il} \Phi^l_{;k} = \Phi_{i,k} - \Phi_l \Gamma_{ik}^l. \quad (22)$$

A tenzorok kovariáns deriváltjának értelmezéséhez egyrészt figyelembe vesszük, hogy a tenzor vektorok diadikus szorzatának módjára transzformálódik, másrészt előírjuk a

$$(\Phi_i \psi_k)_{;l} = \Phi_{i;l} \psi_k + \Phi_i \psi_{k;l}$$

deriválási szabályt ( $\psi_k$  vektortér). Így adódik pl. a  $\Phi$  tenzortér kovariáns deriváltjának tiszta kovariáns komponenseire a

$$\Phi_{ik;l} = \Phi_{ik,l} - \Phi_{mk} \Gamma_{il}^m - \Phi_{im} \Gamma_{kl}^m \quad (23)$$

kifejezés. (23)-ból gyorsan megmutatható, hogy

$$g_{ik;l} = 0. \quad (24)$$

A speciális elmélet négyes tenzoregyenleteiben tehát a parciális deriváltakat kovariáns deriváltakra kell kicserélnünk ( $\mathcal{G}_Q$ -ban  $g_{ik,l}(Q) = 0$  miatt  $\Phi^i_{;k}(Q) = \Phi^i_{,k}(Q)$ ), s a  $d_{kk}, u_k u_k$  típusú mennyiségek helyett  $d_k^k$ -t, illetve  $u_k u^k$ -t kell írunk. A  $\Phi^i$  vektor materiális deriváltja pl.

$$D\Phi^i = u^k \Phi^i_{;k}$$

lesz.

Vezessük be a  $|g_{ik}| = g$  jelölést. Kimutatható, hogy  $g$  mindig negatív, és az  $\eta_{iklm} = (-g)^{1/2} e_{iklm}$  mennyiség pszeudotenzor. Az  $e_{iklm}/i$  objektum helyébe tehát  $\eta_{iklm}$  lép ( $\mathcal{G}_Q$ -ban  $\eta_{iklm}(Q) = e_{iklm}$ ). Eszerint

$$\varepsilon_{ikl} = \eta_{iklm} u^m / c.$$

A téridő metrikájának eltérése a  $\gamma_{ik}$  tenzor leírta Galilei-metrikától lehet pusztán annak a következménye, hogy a vonatkoztatási rendszer inerciarendszerből nézve nem egyenes vonalú egyenletes mozgást végez, vagy hogy az inerciális vonatkoztatási rendszerben görbevonalú koordinátákat választottunk. Ezekben az esetekben — alkalmas transzformációval — áttérhetünk Galilei-metrikájú koordináta-rendszerre. Ha azonban a geometria módosulását ponderábilis anyag vagy erőter jelenléte idézi elő, akkor a  $g_{ik} \equiv \gamma_{ik}$  metrikához semmiféle koordináta-transzformációval nem juthatunk el (permanens gravitációs tér).

A  $g_{ik}(x^r)$  metrikus tenzor ismeretében könnyen eldönthető, hogy a gravitációs tér permanens-e. A Riemann-geometriából ismeretes, hogy az

$$R^i_{;klm} = \Gamma_{kl,m}^i - \Gamma_{km,l}^i + \Gamma_{lm}^i \Gamma_{kl}^r - \Gamma_{rl}^i \Gamma_{km}^r$$



objektum tenzor (Riemann—Christoffel-féle görbületi tenzor). Ha van olyan koordináta-rendszer, amelyben  $g_{ik} = \gamma_{ik}$ , ott

$$R^i_{;klm} \equiv 0; \quad (25)$$

de akkor —  $R$  tenzor-voltának következtében — (25) bármely rendszerben fennáll. Megmutatható [2], hogy (25) nemcsak szükséges, hanem elegendő feltétele is a gravitációs tér kitranszformálhatóságának.

$R^l_{;imk}$ -ből az  $l, m$  indexek egybeejtésével adódik az  $R_{ik}$  szimmetrikus objektum (Ricci-tenzor); ennek  $R^k_k = R$  spurja az invariáns görbület. A dinamikában fontos szerephez jut az

$$S^k_i = R^k_i - \delta^k_i R/2 \quad (26)$$

Einstein-tenzor, amelynek lényeges tulajdonsága, hogy kovariáns divergenciája eltűnik:

$$S^k_{i;k} = 0.$$

## II. KONTINUUM ÁRAMLÁSA INERCIARENDSZERBEN

### 1. A transzportfolyamatok közös mérlegegyenlete

Tekintsük az áramló kontinuumban az  $\mathcal{A}(t)$  materiális zárt felület által határolt  $\mathcal{V}(t)$  térbeli tartományt. Legyen a  $\Phi^{(n)}$   $n$  méretű objektummal leírt extenzív fizikai mennyiség sűrűsége  $\Phi^{(n)}$ , konduktív áramsűrűsége  $j^{(n+1)}$  és forrása  $s^{(n)}$ .  $\mathcal{V}$  térfogatelemét  $dV$ -vel,  $\mathcal{A}$  felületelemét pedig  $d\vec{A}$ -val jelölve nyilván fennáll a

$$(d/dt) \int_{\mathcal{V}(t)} \Phi^{(n)} dV + \oint_{\mathcal{A}(t)} j^{(n+1)} d\vec{A} = \int_{\mathcal{V}(t)} s^{(n)} dV \quad (1)$$

mérlegegyenlet. Szorozzuk át (1)-et  $c$ -vel, és integráljuk  $z_4$  szerint a  $(z'_4, z''_4)$  intervallumra:

$$\begin{aligned} \int_{\mathcal{V}(z'_4)} c \Phi^{(n)} dV - \int_{\mathcal{V}(z'_4)} c \Phi^{(n)} dV + \int_{z'_4}^{z''_4} [(dz_4/i) \oint_{\mathcal{A}(z_4)} j^{(n+1)} d\vec{A}] = \\ = \int_{z'_4}^{z''_4} [(dz_4/i) \int_{\mathcal{V}(z_4)} s^{(n)} dV]. \end{aligned} \quad (2)$$

Bevezetjük a  $\Phi^{(n+1)}_{\dots k}$  objektumot a  $\Phi^{(n+1)}_{\dots x} = \Phi^{(n)}_{\dots x} v_x + j^{(n+1)}_{\dots x}$ ,  $\Phi^{(n+1)}_{\dots 4} = ic \Phi^{(n)}_{\dots}$  definícióval. A téridő azon pontjai, amelyeken az  $\mathcal{A}$ -beli kontinuumpontok a  $(z'_4, z''_4)$  intervallumban áthaladtak, az  $\Omega$  négydimenziós tartományt töltik ki. Ennek háromdimenziós  $\Sigma$  határfelülete három részfelületből tevődik össze: az  $\mathcal{A}$ -ra eső materiális pontok világvonalai által leírt  $\Sigma_A$  világcsőből, s a világcsövet kétfelől lezáró  $\Sigma'$ , illetve  $\Sigma''$  hipersíkidomokból (e síkidomokat a világcső a  $z'_4 = \text{const.}$ , illetve a  $z''_4 = \text{const.}$  hipersíkból vágja ki).

Legyen  $\mathcal{A}$  paraméteres egyenletrendszere  $Z_\lambda = Z_\lambda(b_1, b_2)$ , itt  $b_1$  és  $b_2$  skaláris mennyiség; akkor  $\Sigma_A$  leírható a  $z_x = f_x[Z_\lambda(b_1, b_2), b_3]$ ,  $z_4 = b_3$  egyenletekkel.  $\Sigma'$  és  $\Sigma''$  egyenlete nyilván  $z_x = f_x(Z_\lambda, z'_4)$ ,  $z_4 = z'_4$ , illetve  $z_x = f_x(Z_\lambda, z''_4)$ ,  $z_4 = z''_4$ .  $\Sigma_A$  felületeleme

$$d\sigma_k = (1/i) e_{klmn} (\partial z_l / \partial b_1) (\partial z_m / \partial b_2) (\partial z_n / \partial b_3) db_1 db_2 db_3,$$



azaz

$$d\sigma_{\kappa} = [e_{\kappa\lambda\mu}(\partial z_{\lambda}/\partial b_1)(\partial z_{\mu}/\partial b_2)db_1db_2]dz_4/i = dA_{\kappa}dz_4/i,$$

$$d\sigma_4 = -dA_{\lambda}(\partial z_{\lambda}/\partial z_4)dz_4/i = v_{\lambda}dA_{\lambda}dz_4/c,$$

tehát  $\Sigma_A$  mentén

$$\Phi_{\dots k}^{(n+1)}d\sigma_k = j_{\dots \kappa}^{(n+1)}dA_{\kappa}dz_4/i.$$

$\Sigma'$ -re a  $d\sigma_k$  pszeudovektor kifejezése:

$$d\sigma_k = (1/i)e_{k\lambda\mu\nu}z_{\lambda 1}z_{\mu 2}z_{\nu 3}dZ_1dZ_2dZ_3,$$

vagyis

$$d\sigma_{\kappa} = 0,$$

$$d\sigma_4 = -|z_{\lambda\mu}|dZ_1dZ_2dZ_3/i = -dV/i,$$

és így  $\Sigma'$ -n

$$\Phi_{\dots k}^{(n+1)}d\sigma_k = -c\Phi_{\dots}^{(n)}dV.$$

Világos, hogy akkor  $\Sigma''$  mentén

$$\Phi_{\dots k}^{(n+1)}d\sigma_k = c\Phi_{\dots}^{(n)}dV$$

(hiszen  $d\sigma_k$  a  $\Sigma'$  felületen a negatív,  $\Sigma''$ -n pedig a pozitív  $z_4$  tengely irányába mutat). Jelöljük a téridő  $dVdz_4/i$  térfogatelemét  $d\omega$ -val ( $d\omega$  pszeudoskálár), akkor (2) a mondtak alapján átírható a

$$\oint_{\Sigma} \Phi_{\dots k}^{(n+1)}d\sigma_k = \int_{\Omega} s_{\dots}^{(n)}d\omega \quad (3)$$

formába.  $\Phi_{\dots k}^{(n+1)}$  és  $s_{\dots}^{(n)}$  transzformációs jellege az egyes extenzív mennyiségekre természetesen különböző.

(3)-ból Gauss tételének alkalmazásával adódik a mérlegegyenlet differenciális alakja:

$$\Phi_{\dots k, k}^{(n+1)} = s_{\dots}^{(n)}. \quad (4)$$

A  $\Phi^{(n)}$  extenzív mennyiséget megmaradónak mondjuk, ha sem konduktív árama, sem forrása nincs. Ilyenkor  $\oint_{\Sigma} \Phi_{\dots k}^{(n+1)}d\sigma_k = 0$ , illetve  $\Phi_{\dots k, k}^{(n+1)} = 0$ , és

$$\Phi_{\dots k}^{(n+1)} = \Phi_{\dots}^{(n)}u_k/\gamma. \quad (5)$$

## 2. Mérlegegyenlet a részecskeszámra (kontinuitási egyenlet)

Feltételezzük, hogy a kontinuumban részecskék nem keletkeznek és nem tűnnek el (kizárjuk pl. a kémiai reakciókat), sőt egykomponensű (azaz egyforma részecskékből álló) közegre szorítkozunk. Természetesen a részecskék olyan sűrűn töltik ki a teret, hogy a differenciálható mennyiségterekkel való leírás lehetséges. Mivel konduktív részecskeáram a vezetési áram definíciója értelmében nincs, az  $N$  részecskeszám megmaradó mennyiség.

Legyen a kontinuum valamely materiális térfogatelemében a részecskék száma  $\delta N$ , és jelölje a kontinuumelem térfogatát a választott  $\mathcal{I}$  inerciarendszerben  $dV$ , a sajátrendszerben  $d\tilde{V}$ . Az  $\mathcal{I}$ -beli részecskesűrűség

$$v = \delta N/dV. \quad (6)$$



Tekintetbe véve, hogy  $\delta N$  skalár és  $dV = dV^\circ/\gamma$  (Lorentz-kontrakció), (6)-ból a

$$\dot{v} \equiv n = v/\gamma$$

transzformációs törvényre jutunk. Akkor pedig (5) szerint a  $v_k$  részecskeáramsűrűség időszerű vektor:

$$v_k = nu_k, \quad n > 0. \quad (7)$$

Az  $N$  megmaradását kifejező mérlegegyenlet alakjai:

$$\oint_{\Sigma} v_k d\sigma_k = 0,$$

$$v_{k,k} = 0.$$

A differenciális formából (7) felhasználásával a

$$Dn + n\Theta = 0 \quad (8)$$

egyenlet adódik.

Jelölje  $\varphi^{(n)}$  a  $\Phi^{(n)}$  extenzív mennyiség fajlagos (egy részecskére eső) értékét a sajátrendszerben. Nyilván  $\dot{\Phi}^{(n)} = n\varphi^{(n)}$ , és

$$(\dot{\Phi}^{(n)} u_k)_{,k} = nD\varphi^{(n)}. \quad (9)$$

### 3. Mérlegegyenlet az impulzusra és az energiára

Jelöljük a kontinuum impulzusának sűrűségét  $\vec{g}$ -vel, konduktív áramsűrűségét  $\vec{I}$ -vel, forrását pedig  $\vec{R}$ -rel; legyen továbbá az energia sűrűsége  $w$ , konduktív áramsűrűsége  $\vec{\lambda}$  és forrása  $e$ . Mint ismeretes [2], a ponderábilis anyag impulzus- és energia-jellemzőiből felépülő

$$T_{ix} = g_i v_x + \Pi_{ix}, \quad T_{i4} = icg_i,$$

$$T_{4i} = (i/c)(wv_i + \lambda_i), \quad T_{44} = -w$$

objektum tenzor, az erőterhez kapcsolódó mennyiségekből alkotott

$$f_i = R_i, \quad f_4 = (i/c)e$$

objektum pedig vektor.  $T_{ik}$ -t energiaimpulzus-tenzornak,  $f_i$ -t négyes erőssűrűségnek nevezzük. Az impulzus és az energia közös mérlegegyenletének alakjai tehát:

$$\oint_{\Sigma} T_{ik} d\sigma_k = \int_{\Omega} f_i d\omega,$$

$$T_{ik,k} = f_i. \quad (10)$$

Vezessük be [8] a

$$p_i = -P_{ir} u_r T_{rs}/c^2,$$

$$q_k = -P_{kr} u_r T_{sr},$$

$$t_{ik} = -P_{ir} P_{ks} T_{rs}$$



mennyiségeket; rögtön látható, hogy ezekre fennállnak a

$$p_i u_i = 0, \quad (11)$$

$$q_k u_k = 0, \quad (12)$$

$$t_{ik} u_k = u_k t_{ki} = 0 \quad (13)$$

azonosságok, továbbá

$$\left. \begin{aligned} p_i &\stackrel{0}{=} g_i, & p_4 &\stackrel{0}{=} 0, \\ q_x &\stackrel{0}{=} \lambda_x, & q_4 &\stackrel{0}{=} 0, \\ t_{ix} &\stackrel{0}{=} -\Pi_{ix}, & t_{i4} &\stackrel{0}{=} t_{4i} = t_{44} = 0 \end{aligned} \right\}, \quad (14)$$

Ez utóbbi tulajdonságok alapján  $\mathbf{p}$ -t négyes nem-mechanikai impulzussűrűségnek,  $\mathbf{q}$ -t négyes hőáramsűrűségnek,  $\mathbf{t}$ -t pedig négyes feszültségtenzornak hívjuk.

Az  $u_r u_s T_{rs}/c^2$  skalárt a sajátrendszerben előállítva  $\dot{w}$  adódik. Elemi számolással megmutatható, hogy az energiaimpulzus-tenzort fölbonthatjuk a következőképpen:

$$T_{ik} = \dot{w} u_i u_k / c^2 + p_i u_k + u_i q_k / c^2 - t_{ik}. \quad (15)$$

Ha (15)-öt  $u_i$ -vel átszorozzuk, és figyelembe vesszük a (I. 1), (11), (13) azonosságokat, az

$$u_i T_{ik} = -\dot{w} u_k - q_k \quad (16)$$

összefüggést nyerjük. (I. 6) alkalmazásával (15)-ből

$$u_{i,k} T_{ik} = p_i \alpha_i - u_{i,k} t_{ik}. \quad (17)$$

Szorozzuk meg most (10)-et  $u_i$ -vel. Kihhasználva, hogy

$$u_i T_{ik,k} = (u_i T_{ik})_{,k} - u_{i,k} T_{ik},$$

továbbá tekintetve véve (16)-ot, (17)-et és (9)-et, az

$$n D\varepsilon + q_{k,k} + p_k \alpha_k - t_{kr} u_{k,r} = -f_k u_k \quad (18)$$

egyenlethez jutunk; itt  $\varepsilon$  a fajlagos energia a sajátrendszerben. (18) a termodinamika első főtételenek differenciális alakja.

(15)-ből (8) és (9) segítségével  $\mathbf{T}$  divergenciájára a

$$T_{ik,k} = n u_i D\varepsilon / c^2 + \dot{w} \alpha_i / c^2 + D p_i - p_i D n / n + u_{i,k} q_k / c^2 + u_i q_{k,k} / c^2 - t_{ik,k} \quad (19)$$

kifejezés adódik. Nyilván

$$D p_i - p_i D n / n = n D(p_i / n). \quad (20)$$

Szorozzuk át (10)-et  $P_{ri}$ -vel. (19), (20), (I. 2), (I. 3) és (I. 6) fölhasználásával eljutunk az

$$n \varepsilon \alpha_r / c^2 + P_{ri} [n D(p_i / n) - t_{ik,k}] + u_{r,k} q_k / c^2 = P_{ri} f_i \quad (21)$$

összefüggéshez; (21) a Cauchy-egyenlet relativisztikus általánosítása.

Könnyű megmutatni, hogy a (21)-ben összefoglalt négy egyenletből csak három független. Szorozzuk meg a  $P_{ik} \Phi_k = 0$  formulát — melyben  $\Phi_k$  tetszőleges egyméretű objektum —  $u_i$ -vel, majd használjuk fel (I. 3)-at: kiadódik a  $P_{4k} \Phi_k = 0$  egyenlet.



Eszerint (10) nem helyettesíthető a relativisztikus Cauchy-egyenlettel, hanem csak a (21), (18) rendszerrel.

Ha a kontinuum spinmentes, továbbá a materiális térfogatelemén eloszló impulzusforrásnak és a kontinuumelem egyes határlapjain eloszló konduktív impulzusáramnak mint vektorrendszernek az eredője egyaránt csak vektor (nem vektorcsavar), akkor [6]

$$T_{ik} = T_{ki},$$

s következésképpen

$$p_i = q_i/c^2, \quad t_{ik} = t_{ki}. \quad (22)$$

A továbbiakban — a III. fejezettől eltekintve — erre az esetre szorítkozunk. Ilyenkor [9]

$$\hat{N} = -\hat{\sigma} + \vec{v} \circ \vec{\varphi}/c^2, \quad (23)$$

$$\vec{\lambda} = -\vec{v}\hat{\sigma} + \vec{\varphi}, \quad (24)$$

$$\vec{R} = \vec{F} + \vec{v}\psi/c^2,$$

$$e = \vec{F}\vec{v} + \psi$$

és

$$\vec{g} = (1/c^2)(w\vec{v} - \vec{v}\hat{\sigma} + \vec{\varphi});$$

$\hat{\sigma}$  a rugalmas feszültségek tenzora,  $\vec{\varphi}$  a hőáramsűrűség,  $\vec{F}$  az erőszűrűség,  $\psi$  pedig a hőforrás.

#### 4. Mérlegegyenlet az entrópiára (a termodinamika II. főtétele)

Jelölje az entrópia sűrűségét  $S$ , konduktív áramsűrűségét pedig  $\vec{J}$ . Az entrópiaforrást két részre bonthatjuk: egyik része ( $r$ ) visszavezethető más forrásokra (hőforrás, kémiai forrás), a másik ( $b \equiv 0$ ) a spontán entrópiatermelést írja le. Az 1. alfejezetben elmondottakat követve bevezetjük az  $\eta_k$  négyes objektumot az alábbi definícióval:

$$\eta_x = Sv_x + J_x, \quad \eta_4 = icS,$$

és akkor (3)-at, illetve (4)-et az entrópia esetére így írhatjuk:

$$\oint_{\Sigma} \eta_k d\sigma_k - \int_{\Omega} r d\omega = \int_{\Omega} b d\omega \equiv 0, \quad (25)$$

$$\eta_{k,k} - r = b \equiv 0.$$

Az entrópia a részecskeszámhoz és az elektromos töltéshez hasonlóan skaláris mennyiség [2], így az  $\eta_k$  négyes entrópiaáramsűrűség vektor,  $r$  és  $b$  pedig skalárok.

Bontsuk föl  $\eta_k$ -t (I. 5) szerint  $u_k$ -val párhuzamos és arra merőleges komponensekre. Mivel  $\eta_r u_r = -c^2 S$ ,

$$\eta_k^{\parallel} = \hat{S} u_k = n \sigma u_k \quad (26)$$

( $\sigma$  a fajlagos entrópia a sajátrendszerben), és

$$\eta_k^{\perp} = P_{kr} \eta_r.$$



A párhuzamos komponens  $\eta$  konvektív része,  $\eta_k^\perp$  pedig a konduktív rész ( $\eta_k^\perp \stackrel{0}{=} J_\infty$ ,  $\eta_4^\perp \stackrel{0}{=} 0$ ). (26) és (9) felhasználásával (25)-ből az

$$nD\sigma + \eta_{k,k}^\perp \cong r \quad (27)$$

egyenlőtlenséget kapjuk.

A termodinamikai folyamatot egyszerűnek mondjuk, ha  $\eta_k^\perp = q_k/T$  és  $r = \dot{\psi}/T$ ; itt  $T (>0)$  a sajátrendszerbeli hőmérséklet [6, 10]. A továbbiakban ilyen folyamatokra szorítkozunk. (Nem egyszerű a termodinamikai folyamat, ha pl. a kontinuumban kémiai reakciók is lejátszódnak.) Tekintettel arra, hogy  $f_k u_k \stackrel{0}{=} -\psi$ , (27) így alakul:

$$nD\sigma + q_{k,k}/T - q_k T_{,k}/T^2 \cong -f_k u_k/T. \quad (28)$$

(18) bal oldalát (28)-ba beírva (vagyis a termodinamika I. és II. főtételeit egyesítve) az

$$n(TD\sigma - D\varepsilon) - q_k T_{,k}/T - p_k \alpha_k + t_{kr} u_{k,r} \cong 0 \quad (29)$$

összefüggés áll elő. (29) a Clausius—Duhem-egyenlőtlenség relativisztikus általánosítása.

Vegyük most figyelembe (22)-t, és vezessük be  $\varepsilon$  helyett a  $\varphi = \varepsilon - T\sigma$  sajátrendszerbeli fajlagos szabad energiát. (29) akkor a

$$-n(D\varphi + \sigma DT) - q_k(T_{,k} + T\alpha_k/c^2)/T + t_{kr} u_{k,r} \cong 0 \quad (30)$$

alakot ölti.

Befejezésül megjegyezzük, hogy mivel a kontinuum általában nincs termikus egyensúlyban,  $T$  és  $\sigma$  szigorú definíciója nem azonos a termodinamikában megszokottal [11]. Ha folyékony közegben termikus egyensúly esetén  $T = f_1(n, \varepsilon)$  és  $\sigma = f_2(n, \varepsilon)$ , akkor nem egyensúlyi esetben is az  $f_1(n, \varepsilon)$  mennyiséget nevezzük hőmérsékletnek és  $f_2(n, \varepsilon)$ -t fajlagos entrópiának.

### III. KONTINUUM MOZGÁSA GRAVITÁCIÓS ÉS ELEKTROMÁGNESES TÉRBEN

#### 1. Az Einstein-féle gravitációs téregyenlet

Az általános relativitáselmélet felfogása szerint a gravitációs hatások a téridő geometriájának megváltozásában tükröződnek, a geometriára vonatkozó információk hordozója pedig a mértéktenzor. Mivel a (permanens) gravitációs jelenségeket a kontinuum és az erőtér jelenléte idézi elő, és az anyag fizikai állapotának fő jellemzőit az energiaimpulzus-tenzorban foglaljuk össze, kapcsolatnak kell fennállnia a metrikus tenzor és az anyag energiaimpulzus-tenzora között.

Feltesszük, hogy az erőtérhez tartozik olyan  $\theta_i^k$  (nem feltétlenül szimmetrikus) tenzor, amelynek kovariáns divergenciája az  $f_i$  négyes erőssűrűség ellentettjét adja;  $\theta$ -t az erőtér energiaimpulzus-tenzorának nevezzük. (II. 10) szerint akkor

$$(T_i^k + \theta_i^k)_{;k} = 0. \quad (1)$$

A kontinuum és az erőtér zárt rendszert alkot, ezért az impulzusmomentum mérleg-egyenlete megköveteli, hogy a  $T_{ik} + \theta_{ik}$  teljes energiaimpulzus-tenzor szimmetrikus



legyen [6]:

$$T_{[ik]} = -\theta_{[ik]}. \quad (2)$$

A (II. 15) felbontásból következik, hogy

$$T_{[ik]} = p_{[i} u_{k]} + u_{[i} q_{k]}/c^2 - t_{[ik]}. \quad (3)$$

(3)-at  $u^k$ -val átszorozva és figyelembe véve (2)-t, a következő összefüggést kapjuk  $p$  és  $q$  között:

$$p_i = (q_i + 2u^k \theta_{[ik]})/c^2. \quad (4)$$

Könnyen kiszámíthatjuk a négyes feszültségtenzor ferdeszimmetrikus részét is; evégből (3)-at  $P_r^k$ -val szorozzuk meg, majd felhasználjuk a (I. 3), (II. 11–13) azonosságokat és (4)-et. A végeredmény:

$$t_{[ir]} = \theta_{[ir]} + u^k (\theta_{[ik]} u_r - u_i \theta_{[rk]})/c^2. \quad (5)$$

Einstein téregyenlete a (I. 26)-tal definiált  $S$  tenzor és a teljes energiimpulzus-tenzor arányosságát állítja:

$$S_i^k = -(8\pi f/c^4)(T_i^k + \theta_i^k); \quad (6)$$

itt  $f$  a gravitációs állandó. Az egyenlet mindkét oldalán szimmetrikus és divergencia-mentes tenzor áll. Az arányossági tényező értékét az a követelmény szabja meg, hogy első közelítésben a Newton-féle gravitációs elméletre kell jutnunk.

A tenzorok szimmetriája miatt (6) tíz egyenletet foglal magában, de megmutatható [2], hogy ezek közül csak hat független. A mértéktenzor komponenseit tehát a téregyenlet csak négy tetszőleges függvény erejéig határozza meg, összhangban azzal, hogy a koordináta-rendszer megválasztásában szabadságunk van.

## 2. Áramlás elektromágneses tér jelenlétében

Ismeretes, hogy kontinuumban az elektromágneses tér két ferdeszimmetrikus objektummal, az  $F$ ,  $G$  térerősség-tenzorokkal írható le. A kontinuum sajátrendszerében

$$\left. \begin{aligned} F_{i\kappa} &= e_{i\kappa\lambda} B^\lambda, & F_{i4} &= E_i; \\ G_{i\kappa} &= e_{i\kappa\lambda} H^\lambda, & G_{i4} &= D_i; \end{aligned} \right\} \quad (7)$$

$\vec{E}$  az elektromos,  $\vec{H}$  a mágneses térerősség,  $\vec{D}$  az elektromos,  $\vec{B}$  pedig a mágneses indukció.

A  $\Phi$  ferdeszimmetrikus tenzor  ${}^+\Phi$  duálisán a

$${}^+\Phi_{ik} = (1/2)\eta_{iklm}\Phi^{lm}$$

formulával definiált — szintén ferdeszimmetrikus — pszeudotenzort értjük. Ha  $i, k, l, m$  az 1, 2, 3, 4 számok páros permutációja, akkor nyilván

$${}^+\Phi_{ik} \stackrel{0}{=} \Phi^{lm}.$$



Ezek szerint az  ${}^+F$ ,  ${}^+G$  objektumok komponensei a sajátrendszerben:

$$\left. \begin{aligned} {}^+F_{1x} &= -e_{1x\lambda} E^\lambda, & {}^+F_{14} &= B_1; \\ {}^+G_{1x} &= -e_{1x\lambda} D^\lambda, & {}^+G_{14} &= H_1 \end{aligned} \right\}. \quad (8)$$

A Maxwell-féle elektrodinamikából tudjuk, hogy (nyugvó kontinuumban) az elektromágneses tér energiasűrűsége

$$w = (1/8\pi)(\vec{E}\vec{D} + \vec{H}\vec{B}), \quad (9)$$

energiaáramsűrűsége (a Poynting-vektor)

$$\vec{S} = (c/4\pi)\vec{E} \times \vec{H}, \quad (10)$$

impulzussűrűsége

$$\vec{g} = (1/4\pi c)\vec{D} \times \vec{B} \quad (11)$$

és impulzusáramsűrűsége (a Maxwell-féle feszültségi tenzor ellentettje):

$$\hat{\pi} = -(1/4\pi)[\vec{E} \circ \vec{D} + \vec{H} \circ \vec{B} - (1/2)(\vec{E}\vec{D} + \vec{H}\vec{B})\hat{1}] \quad (12)$$

(Gauss-féle elektrosztatikus egységrendszert használunk;  $\hat{1}$  az idemtenzor jele). A tér energiaimpulzus-tenzorának felépítéséhez szükséges  $\hat{w}$ ,  $\mathbf{p}$ ,  $\mathbf{q}$ ,  $\mathbf{t}$  mennyiségeket tehát úgy kell megszerkesztenünk, hogy fennálljanak a

$$\left. \begin{aligned} \hat{w} &\stackrel{0}{=} (1/8\pi)(\vec{E}\vec{D} + \vec{H}\vec{B}), \\ p_i &\stackrel{0}{=} g_i, & p_4 &\stackrel{0}{=} 0, \\ q_i &\stackrel{0}{=} S_i, & q_4 &\stackrel{0}{=} 0, \\ t_{ix} &\stackrel{0}{=} -\pi_{ix}, & t_{i4} &\stackrel{0}{=} t_{4i} = t_{44} = 0 \end{aligned} \right\} \quad (13)$$

összefüggések.

Alkossuk meg a térerősség-tenzorokból a négyes térerősség- és indukcióvektorokat a következő módon:

$$\left. \begin{aligned} e_i &= F_{ik} u^k/c, & h_i &= {}^+G_{ik} u^k/c, \\ d_i &= G_{ik} u^k/c, & b_i &= {}^+F_{ik} u^k/c \end{aligned} \right\}. \quad (14)$$

(7)-et és (8)-at figyelembe véve azonnal belátható, hogy a sajátrendszerben a négyes térerősség-, illetve indukcióvektorok első három komponense megegyezik a megfelelő hármas térerősség- illetve indukciókomponensekkel, a negyedik komponensek pedig eltűnnek. Eszerint ha a  $\hat{w}$ ,  $\mathbf{p}$ ,  $\mathbf{q}$ ,  $\mathbf{t}$  mennyiségeket rendre (9), (10), (11) és (12) mintájára szerkesztjük meg az  $\mathbf{e}$ ,  $\mathbf{d}$ ,  $\mathbf{h}$ ,  $\mathbf{b}$  vektorokból, a (13) egyenletek teljesülnek. Mivel  $\hat{1}$  helyébe nyilván  $\mathbf{P}$  lép:

$$\begin{aligned} \hat{w} &= (1/8\pi)(e_r d^r + h_r b^r), \\ q_i &= (1/4\pi)\eta_{ilmn} e^l h^m u^n, \\ p_i &= (1/4\pi c^2)\eta_{ilmn} d^l b^m u^n, \\ t_{ik} &= (1/4\pi)[e_i d_k + h_i b_k - (1/2)(e_r d^r + h_r b^r) P_{ik}]. \end{aligned}$$



Ezekből a mennyiségekből a  $\theta_{ik}$  energiaimpulzus-tenzor (II. 15) szerint építhető fel:

$$4\pi\theta_{ik} = (g_{ik}/2 + u_i u_k/c^2)(e_r d^r + h_r b^r) + (1/c^2)(u_i \eta_{klmn} e^l h^m u^n + u_k \eta_{ilmn} d^l b^m u^n) - e_i d_k - h_i b_k. \quad (15)$$

Most visszavezetjük  $\theta$ -t a térerősség-tenzorokra. (14) alapján

$$\begin{aligned} e_i d_k &= (1/c^2) F_{il} G_{km} u^l u^m, \\ h^i b_k &= (1/c^2) + G^{il} + F_{km} u_i u^m. \end{aligned} \quad (16)$$

A

$$+ G^{il} + F_{km} = (1/4) \eta^{ilpq} \eta_{kmrs} G_{pq} F^{rs}$$

szorzat kiszámításához vegyük tekintetbe, hogy

$$\eta^{ilpq} = -(-g)^{-1/2} e^{ilpq}, \quad (17)$$

és használjuk fel az

$$\begin{aligned} e^{ilpq} e_{kmrs} &= \delta_{kmrs}^{ilpq} + \delta_{kmrs}^{ilpq} + \delta_{kmrs}^{ilpq} - \delta_{kmrs}^{ilpq} - \delta_{kmrs}^{ilpq} - \delta_{kmrs}^{ilpq} - \\ &- \delta_{kmrs}^{ilpq} - \delta_{kmrs}^{ilpq} - \delta_{kmrs}^{ilpq} + \delta_{kmrs}^{ilpq} + \delta_{kmrs}^{ilpq} + \delta_{kmrs}^{ilpq} + \\ &+ \delta_{kmrs}^{ilpq} + \delta_{kmrs}^{ilpq} + \delta_{kmrs}^{ilpq} - \delta_{kmrs}^{ilpq} - \delta_{kmrs}^{ilpq} - \delta_{kmrs}^{ilpq} - \\ &- \delta_{kmrs}^{ilpq} - \delta_{kmrs}^{ilpq} - \delta_{kmrs}^{ilpq} + \delta_{kmrs}^{ilpq} + \delta_{kmrs}^{ilpq} + \delta_{kmrs}^{ilpq} \end{aligned} \quad (18)$$

azonosságot (itt a  $\delta_k^i \delta_m^l \delta_r^p \delta_s^q = \delta_{kmrs}^{ilpq}$  rövidítést alkalmaztuk). A következő eredményre jutunk:

$$\begin{aligned} + G^{il} + F_{km} &= -F^{il} G_{km} + F^{ir} G_{kr} \delta_m^l - F^{ir} G_{mr} \delta_k^l - F^{lr} G_{kr} \delta_m^i + \\ &+ F^{lr} G_{mr} \delta_k^i + (1/2) F^{rs} G_{sr} (\delta_k^i \delta_m^l - \delta_m^i \delta_k^l). \end{aligned}$$

Ezek után (figyelembe véve még (I. 1)-et) gyorsan adódik a

$$\begin{aligned} h_i b_k &= -F_{ir} G_{ks}^r - (1/c^2)(F_{ir} G_{ks} u^r u^s + F_{is} G_{kr}^s u_k u_r + F_{rs} G_k^s u_i u^r + \\ &+ F_{lr} G_{rs}^r u^l u^s g_{ik}) - (1/2) F_{rs} G^{sr} P_{ik} \end{aligned} \quad (19)$$

kifejezés.

(16)-ból és (19)-ből kontrakcióval nyerjük, hogy

$$e_r d^r + h_r b^r = -(1/2) F_{rs} G^{sr} + (2/c^2) F_{lr} G^{ls} u^r u_s. \quad (20)$$

Tekintettel (14)-re és (17)-re

$$\eta_{klmn} e^l h^m u^n = -(1/2c^2) e_{mklm} e^{mqr} F^{lp} G_{rs} u_p u_q u^n.$$

Alkalmazzuk most a (18)-ből eredő

$$e_{mklm} e^{mqr} = \delta_{klm}^{qrs} + \delta_{klm}^{qrs} + \delta_{klm}^{qrs} - \delta_{klm}^{qrs} - \delta_{klm}^{qrs} - \delta_{klm}^{qrs} \quad (18')$$

( $\delta_{klm}^{qrs} = \delta_k^q \delta_l^r \delta_m^s$ ) azonosságot. Rövid számolás után az

$$\eta_{klmn} e^l h^m u^n = F_{rs} G_k^r u^s + (1/c^2)(F_{pr} G_{ks} u^p u^r u^s + F_{pr} G_s^p u_k u^r u^s) \quad (21)$$

eredményt kapjuk. Nyilvánvaló akkor, hogy

$$\eta_{ilmn} d^l b^m u^n = F_{ir} G_{rs}^r u^s + (1/c^2)(F_{is} G_{pr} u^p u^r u^s + F_{sp} G_r^p u_i u^r u^s). \quad (22)$$



Helyettesítsük be a (16), (19), (20), (21), (22) kifejezéseket a (15) egyenletbe. Az összevonások elvégzése után az elektromágneses tér energiaimpulzus-tenzorára a következő egyszerű összefüggés adódik:

$$\theta_{ik} = (1/4\pi)[F_{ir}G_k^r + (1/4)g_{ik}F_{rs}G^{sr}]$$

(Minkowski-féle energiaimpulzus-tenzor).  $\theta$  általában nem szimmetrikus, következésképpen  $T_{[ik]}$  sem tűnik el: az elektromos és mágneses polarizáció miatt ugyanis a kontinuum térfogatelemén eloszló impulzusforrásnak mint vektorrendszernek az eredője vektorcsavar.

A töltés- és árameloszlás leírása a  $C^i$  négyes elektromos áramsűrűség-vektorral történik. Geodetikus rendszerben

$$C^\alpha = \varrho v^\alpha + i^k, \quad C^4 = \varrho c;$$

$\varrho$  a töltéssűrűség,  $\vec{i}$  pedig a hármass konduktív áramsűrűség. (I. 5a) szerint  $C^i$ -nek a négyes sebességgel párhuzamos komponense  $\tilde{\varrho}u^i$  (hiszen  $C^ku_k \stackrel{0}{=} -\varrho c^2$ ), úgyhogy

$$C^i = \tilde{\varrho}u^i + k^i, \quad k^r u_r = 0;$$

$\tilde{\varrho}u$  a konvektív,  $k$  a konduktív négyes áramsűrűség.

Az elektromágneses tér meghatározásához rendelkezésünkre állnak a

$$G_i^k{}_{;k} = (4\pi/c)C_i, \quad (23)$$

$$+F_i^k{}_{;k} = 0 \quad (24)$$

Maxwell-egyenletek [7].  $G$  és  $k$  a konstitutív független változókul választott elektromágneses és termomechanikai mennyiségek funkcionálja, a független változókat és a funkcionálok alakját a kontinuum anyagi minősége szabja meg [6].

#### IV. HIDRODINAMIKA

##### 1. Az egyszerű folyadék konstitutív egyenletei

A kontinuum mérlegegyenleteiben szereplő négyes feszültség, négyes hőáram-sűrűség, fajlagos szabad energia és fajlagos entrópia bizonyos, a termomechanikai folyamatok leírásában alapvető mennyiségek (a konstitutív független változók) funkcionálja. A konstitutív elmélet feladata abban áll, hogy a kontinuum speciális tulajdonságaiból kiindulva és szem előtt tartva a mérlegegyenleteket, összeállítsa a független változók halmazát, majd meghatározza a konstitutív funkcionálok alakját.

A nemrelativisztikus konstitutív elméletben [12] a folyadékok független változói: a (hármass) deformációsebességi tenzor, a hőmérséklet, ezek időderiváltjai (adott rendig), az eddig felsorolt mennyiségek gradiensei (adott rendig) és a sűrűség. A folyadékot egyszerűnek mondjuk, ha az említett gradiensek közül csak a hőmérsékletnek és időderiváltjainak az első gradiense szerepel a konstitutív funkcionálok argumentumában. Memória nélküli a folyadék, ha az említett időderiváltak (gradienseikkel együtt) mind hiányoznak a független változók sorából.



A relativisztikus tárgyalásban az egyik független változó kézenfekvően az I. fejezetben definiált  $\mathbf{d}$  négyes deformációsebességi tenzor lesz, egy másik pedig a sajátrendszerre vonatkozó hőmérséklet. A nem megmaradó sűrűség helyét a sajátrendszerbeli részecskesűrűség foglalja el.

A nemrelativisztikus Clausius—Duhem-egyenlőtlenséget [12] a (II. 30) formulával összehasonlítva első pillantásra úgy tűnik, hogy a hármas hőmérsékleti gradiens helyébe a relativisztikus tárgyalásban a  $T_{,k} + T\alpha_k/c^2$  kifejezés lép, azonban e vektor negyedik komponense általában nem zérus a sajátrendszerben. A megfelelő vektor [6, 10, 13]:

$$\vartheta_k = P_k^r(T_{,r} + T\alpha_r/c^2),$$

ugyanis

$$\vartheta_i \stackrel{0}{=} T_{,i} + (1/c^2)T\partial v_i/\partial t, \quad (1)$$

$$\vartheta_4 \stackrel{0}{=} 0,$$

és — tekintettel (II. 12)-re —

$$q^k \vartheta_k = q^k (T_{,k} + T\alpha_k/c^2). \quad (2)$$

(1) jobb oldalán a második tag a  $c \rightarrow \infty$  nemrelativisztikus határesetben eltűnik, (2) pedig azt mutatja, hogy (II. 30)-ban a  $T_{,k} + T\alpha_k/c^2$  kifejezés  $\vartheta_k$ -val helyettesíthető. (I. 3) miatt

$$\vartheta_k u^k = 0. \quad (3)$$

Felhasználva (II. 13)-at és figyelembe véve, hogy  $\mathbf{t}$  szimmetrikus, könnyen adódik a

$$t_k^r d_r^k = t_k^r u^k{}_{;r}$$

összefüggés. (II. 30)-at tehát így is írhatjuk:

$$-n(D\varphi + \sigma DT) - q^k \vartheta_k/T + t_k^r d_r^k \geq 0. \quad (4)$$

A nemrelativisztikus elméletben kimutatható, hogy a hármas örvénytenzor nem szerepelhet a folyadék konstitutív funkcionáljainak argumentumában. A relativisztikus tárgyalásban azonban  $\omega$  nem zárható ki a független változók közül [6]. Feltehető viszont, hogy legalábbis a folyékony közegek egy része leírható az örvénytenzornak mint konstitutív független változónak a szerepeltetése nélkül. A továbbiakban vizsgálatainkat olyan közegekre korlátozzuk, amelyeknek konstitutív funkcionáljai csak a  $\mathbf{d}$ ,  $T$ ,  $n$ ,  $\mathbf{\vartheta}$ ,  $\mathbf{u}$  mennyiségektől függnek; ezeket a kontinuumokat röviden egyszerű folyadékoknak fogjuk nevezni. A négyes sebesség fölvételét a független változók közé az indokolja, hogy a hármas idemtenzor helyébe kerülő projektor tartalmazza  $\mathbf{u}$ -t.

(I. 1) és (3) miatt  $\mathbf{u}$ -nak és  $\mathbf{\vartheta}$ -nak csak három komponense független. A deformációsebesség tenzora szimmetrikus, és fennáll reá (I. 7), tehát csak hat független komponense van. Így a konstitutív funkcionálok argumentumában az  $n$ ,  $T$ ,  $u_i$ ,  $\vartheta_i$ ,  $d_{\lambda\mu}$  ( $\lambda \geq \mu$ ) független mennyiségek lépnek fel.

A Clausius—Duhem-egyenlőtlenség több megszorítást ad a funkcionálok alakjára. Vegyük tekintetbe, hogy

$$D\varphi = (\partial\varphi/\partial n)Dn + (\partial\varphi/\partial T)DT + (\partial\varphi/\partial u_i)\dot{u}_i + (\partial\varphi/\partial \vartheta_i)\dot{\vartheta}_i + (\partial\varphi/\partial d_{\lambda\mu})\dot{d}_{\lambda\mu}$$



(ponttal a sajátidő szerinti deriválást jelöltük), és használjuk fel a (II. 8), (I. 8) képleteket, akkor (4)-et így írhatjuk:

$$-n[(\partial\varphi/\partial T + \sigma)DT + (\partial\varphi/\partial u_i)\dot{u}_i + (\partial\varphi/\partial \vartheta_i)\dot{\vartheta}_i + (\partial\varphi/\partial d_{\lambda\mu})\dot{d}_{\lambda\mu}] - q^k \vartheta_k/T + [n^2(\partial\varphi/\partial n)P_k^r + t_k^r]d_r^k \equiv 0. \quad (5)$$

A  $DT$ ,  $\dot{u}_i$ ,  $\dot{\vartheta}_i$ ,  $\dot{d}_{\lambda\mu}$  mennyiségek a konstitutív független változóktól is, egymástól is függetlenek\*, következésképp fenn kell állniuk a

$$\left. \begin{aligned} \partial\varphi/\partial u_i &= 0 \\ \partial\varphi/\partial \vartheta_i &= 0 \\ \partial\varphi/\partial d_{\lambda\mu} &= 0 \end{aligned} \right\}, \quad (6)$$

$$\partial\varphi/\partial T = -\sigma \quad (7)$$

egyenleteknek. (6) azt fejezi ki, hogy

$$\varphi = \varphi(n, T),$$

és (7) szerint a fajlagos entrópia is csak az  $n$ ,  $T$  változópár funkcionálja. Ezek az eredmények összhangban vannak a II. fejezet 4. alfejezetének végén tett megjegyzéssel.

A termodinamikából ismeretes, hogy

$$(\partial\varphi/\partial n)_T = p/n^2;$$

itt  $p$  a sajátrendszerbeli hidrosztatikus nyomás. A

$$\tau_{ik} = t_{ik} + pP_{ik} \quad (8)$$

mennyiség a négyes feszültségtenzor disszipatív része. (II. 13) és (I. 3) következtében

$$\tau_{ik}u^k = 0. \quad (9)$$

(6), (7) és (8) felhasználásával az (5) egyenlőtlenség alaposan leegyszerűsíthető:

$$\tau_k^r d_r^k - q^k \vartheta_k/T \equiv 0. \quad (10)$$

A  $\tau$ -t és  $q$ -t megadó funkcionálok folytonosságát feltételezve könnyen megmutathatjuk, hogy ha  $d$  és  $\vartheta$  zérus, akkor  $\tau$ -nak és  $q$ -nak is el kell tűnnie. Tegyük fel ugyanis, hogy  $\tau_{ik}(d_{rs}=0, \vartheta_r=0) \neq 0$ . Válasszuk  $\vartheta_i$ -t zérusnak és  $d_{ik}$ -t kicsinynek úgy, hogy  $\tau_k^r d_r^k$  pozitív legyen. Ha most  $d$  minden komponensének megváltoztatjuk az előjelét,  $\tau_k^r d_r^k$  negatívvá válik (hiszen  $\tau$  komponensei a feltételezett folytonosság miatt csak kicsiny mértékben változnak meg), és ez ellentmond (10)-nek. A  $q_i(d_{rs}=0, \vartheta_r=0)=0$  állítás ugyanezzel a gondolatmenettel igazolható.

\* Mivel  $T_{,i}$ -nek négy független komponense van,  $DT$  független  $\vartheta_i$ -től. Másrészt  $d_{\lambda\mu}$  és  $\dot{u}_i$  is függetlenek, hiszen  $u_{i,r}$  tizenkét független mennyiséget jelent.



## 2. A perfekt folyadék

### a) Energiaimpulzus-tenzor, mozgásegyenlet, energiaegyenlet

Ha a folyékony kontinuum nem vezeti a hőt ( $\vec{\varphi} \stackrel{0}{=} \vec{0}$ ), és nem ébrednek benne viszkózus feszültségek ( $\hat{\sigma} \stackrel{0}{=} -p\hat{1}$ ), akkor perfekt folyadéknak nevezzük. (II. 14), (II. 23), (II. 24) és (8) értelmében ilyen közegre

$$q_i = 0 \quad (11)$$

és

$$\tau_{ik} = 0, \quad (12)$$

az energiaimpulzus-tenzort pedig — tekintettel a (II. 15) felbontásra és (II. 22)-re — a

$$T_i^k = (\overset{\circ}{w} + p)u_i u^k / c^2 + p\delta_i^k \quad (13)$$

kifejezés adja.

Írjuk be a (II. 21) általános mozgásegyenletbe (11)-et és (12)-t. Felhasználva a

$$P_{k;r}^r = (\Theta u_k + \alpha_k) / c^2$$

azonosságot, a (I. 2), (I. 3), (I. 4) összefüggéseket, és bevezetve a

$$\chi = \varepsilon + p/n \quad (14)$$

sajátrendszerbeli fajlagos entalpiát, a következő formulához jutunk:

$$(n\chi/c^2)\alpha_i = P_i^k(f_k - p_{,k}). \quad (15)$$

(15) a hidrodinamikai Euler-egyenlet relativisztikus általánosítása hőt nem vezető folyadékokra.

A (II. 18) energiaegyenlet perfekt folyadéokra érvényes

$$nD\varepsilon + p\Theta + f_k u^k = 0 \quad (15')$$

alakját (I. 6) segítségével kaphatjuk.

### b) A relativisztikus Bernoulli-egyenlet

Foglalkozzunk most a perfekt folyadék erőmentes térben lezajló stacionárius áramlásával. (II. 10) szerint ebben az esetben

$$T_{i;k}^k = 0. \quad (16)$$

(13), (14) és (I. 8) alkalmazásával (16)-ból a

$$D(\chi u_i) = -(c^2/n)p_{,i}$$

egyenlet adódik. Vegyük ennek a negyedik komponensét, és használjuk ki, hogy az áramlás stacionárius: a

$$D(\chi u_4) = 0 \quad (17)$$

formula áll elő.

(I. 21) és (I. 22) értelmében

$$u^k(\chi u_4)_{;k} = u^k(\chi u_4)_{,k} + (1/2)\chi u^k u^r (g_{4k,r} - g_{kr,4} - g_{r4,k}),$$



ámde most  $\partial/\partial x^4 = 0$ , úgyhogy (17) a

$$d(\chi u_4)/d\tau = 0$$

alakba írható. Ez azt jelenti, hogy áramvonal mentén

$$\chi u_4 = \text{const.} \quad (18)$$

(I. 19) alapján

$$u_4 = \Gamma c(g_{4x} v^x/c + g_{44}). \quad (19)$$

Írjuk be (19)-et (18)-ba, és részletezzük  $\Gamma$ -t (I. 18) felhasználásával:

$$\chi \{(-g_{44})/[1 - (v^2/c^2)((-g_{44})^{1/2} - g_{4x} v^x/c(-g_{44})^{1/2})^{-2}]\}^{1/2} = \text{const.} \quad (20)$$

(18), illetve (20) a Bernoulli-egyenlet relativisztikus megfelelője. A  $v^x=0$  sztatikus esetben

$$\chi(-g_{44})^{1/2} = \text{const.}$$

az egész folyadéktérben.

Ha a vonatkoztatási rendszer inerciális,  $u_4 = -\gamma c$ , és így (18)-ból a

$$\chi(1 - v^2/c^2)^{-1/2} = \text{const.}$$

egyszerű forma adódik.

c) Az energiasűrűség, a hőáramsűrűség és a hármas feszültségek kifejezése inerciarendszerben

A (II. 15) felbontás alapján

$$w(= -T_{44}) = \gamma^2 \tilde{w} - 2(i/c)\gamma q_4 + t_{44}, \quad (21)$$

perfekt folyadéokra így

$$w = \gamma^2[\tilde{w} + (v^2/c^2)p].$$

A hármas és négyes hőáramsűrűség közti kapcsolatot [9]-ből vesszük át:

$$\varphi_i = \gamma[q_i + (i/c)v_i q_4]; \quad (22)$$

mivel most  $q_i = 0$ ,

$$\varphi_i = 0.$$

A hármas és négyes feszültségek közötti összefüggés előállítására végett részletezzük  $t_{ik}$  definíciós képletében  $T_{rs}$ -t (II. 23—24) felhasználásával. Az elemi számolás a

$$\sigma_{ix} = t_{ix} + (i/c)t_{i4}v_x \quad (23)$$

eredményre vezet. Ebből esetünkre a

$$\sigma_{ix} = -p\delta_{ix}$$

kifejezést kapjuk. Perfekt folyadékban tehát a feszültségi állapot minden inerciarendszerben izotrop, sőt a nyomás invariáns mennyiség.



### 3. A Stokes-folyadék

a) Energiaimpulzus-tenzor. A hidrodinamikai probléma egyenlet-rendszere

Tegyük fel, hogy  $\tau$  és  $q$  kifejezéséből a  $d$ ,  $\vartheta$  független változókból másod- vagy magasabb fokú tagokat elhagyhatjuk. Ekkor a négyes feszültségi tenzor disszipatív része

$$\tau_i^k = \lambda \Theta P_i^k + 2\mu d_i^k, \quad (24)$$

a négyes hőáramsűrűség pedig

$$q_i = -\kappa \vartheta_i \quad (25)$$

alakú; a  $\lambda$ ,  $\mu$ ,  $\kappa$  skalárok az  $n$ ,  $T$  változó pára funkcionáljai. (A  $g$  és az  $u \otimes u$  tenzor csak a  $P$  kombinációban jelenhet meg  $\tau$  kifejezésében, hiszen  $\dot{g}_4^4 \neq 0$ ,  $\dot{u}_4^4 \neq 0$ . A  $\vartheta_{(i} u_{k)}$  tenzor pedig azért nem léphet fel (24)-ben, mert  $\vartheta_{(i} u_{k)}^0 = c \vartheta_i / 2 \neq 0$ . Végül az  $f(n, T) P_i^k$  tag  $\tau$  feltételezett folytonossága miatt hiányzik (24) jobb oldaláról.)

Helyettesítsük be (10)-be a (24), (25) kifejezéseket, és alkalmazzuk a (I. 8) azonosságot: a  $\lambda$ ,  $\mu$ ,  $\kappa$  mennyiségekre a

$$\lambda \Theta^2 + 2\mu d_k^r d_r^k + (\kappa/T) \vartheta_k \vartheta^k \equiv 0 \quad (26)$$

megszorítást kapjuk. Válasszuk először  $d$ -t zérusnak. Mivel  $\vartheta_k$  a  $T_{,k} + T \alpha_k / c^2$  vektor  $u$ -ra merőleges komponense,  $\vartheta_k \vartheta^k \equiv 0$ , és így (26)-ból következik, hogy

$$\kappa \equiv 0.$$

Bevezetjük a

$$\Delta_i^k = d_i^k - (\Theta/3) P_i^k$$

tenzort; könnyen belátható, hogy fennállnak reá a

$$\begin{aligned} \Delta_k^k &= 0, \\ \Delta_i^k u_k &= 0, \\ \Delta_k^r P_r^k &= 0 \end{aligned} \quad (27)$$

azonosságok. (27) és (I. 4) felhasználásával előállítható a

$$d_k^r d_r^k = \Delta_k^r \Delta_r^k + \Theta^2/3 \quad (28)$$

összefüggés. Ezt (26)-ba beírva a

$$(\lambda + 2\mu/3) \Theta^2 + 2\mu \Delta_k^r \Delta_r^k + (\kappa/T) \vartheta_k \vartheta^k \equiv 0 \quad (29)$$

forma adódik. Alkalmazzuk a továbbiakban a

$$\lambda + 2\mu/3 = \zeta$$

jelölést. Figyelemre méltó, hogy

$$\Delta_k^r \Delta_r^k \equiv 0, \quad (30)$$

hiszen a sajátrendszerben ezt a skalárt a  $\sum_{i,\kappa} [(u_{i,\kappa} + u_{\kappa,i})/2 - (\delta_{i\kappa}/3) \sum_{\lambda} u_{\lambda,\lambda}]^2$  kifejezés adja.



Tekintsük most a  $\mathfrak{g} = 0$ ,  $\Theta = 0$  esetet. (29)-ből (30) figyelembevételével azt kapjuk, hogy

$$\mu \equiv 0.$$

Végül legyen  $\mathfrak{g} = 0$  és  $d_k^r d_r^k = 0$ , ekkor  $\Theta$ -nak nem kell eltűnnie. (Ellenben ha  $d_k^r d_r^k = 0$ , akkor — tekintettel (28)-ra és (30)-ra —  $\Theta$  is zérus.) Így (29)-ből a

$$\zeta \equiv 0$$

következtetésre jutunk.

Ha az egyszerű folyadékban a négyes feszültségtenzor disszipatív részét a

$$\tau_i^k = 2\mu d_i^k + (\zeta - 2\mu/3)\Theta P_i^k \quad (31)$$

kifejezés adja, a négyes hőáramsűrűséget pedig (25), akkor a közeget Stokes-folyadék-nak nevezzük. (II. 15)-ből kiindulva felírhatjuk e kontinuum energiaimpulzus-tenzorát:

$$T_i^k = [n\chi - (\zeta - 2\mu/3)\Theta]u_i u^k/c^2 + [p - (\zeta - 2\mu/3)\Theta]\delta_i^k - \\ - 2\kappa \vartheta_{(i} u_{k)}/c^2 - 2\mu d_i^k.$$

Foglalkozzunk az erőmentes térben lejátszódó áramlásokkal. Ekkor (II. 10) szerint  $T_{i,k}^k = 0$ ; rendelkezésünkre állnak továbbá a (III. 6), (II. 8), (I. 1) összefüggések (természetesen  $\theta_i^k = 0$ ), és ismernünk kell a  $\chi$ ,  $p$ ,  $\mu$ ,  $\zeta$ ,  $\kappa$  skalárokat mint  $n$  és  $T$  függvényeit (ezek a kapcsolatok az állapotegyenletek). A hidrodinamikai probléma egyenletrendszere tehát 17 független egyenletet ölel fel. Ezekben az  $u$ ,  $g$ ,  $n$ ,  $T$ ,  $\chi$ ,  $p$ ,  $\mu$ ,  $\zeta$ ,  $\kappa$  mennyiségek szerepelnek, összesen 21 téridő-függvény, összhangban a III. fejezet 1. alfejezetének végén mondottakkal.

#### b) A spontán entrópiaprodukció

Az entrópia spontán forrását (10) bal oldalának  $T$ -ed része adja, mert (II. 29) előállításakor az entrópiamérleget  $T$ -vel átszoroztuk. Felhasználva (2)-t és a (9) figyelembevételével gyorsan adódó

$$\tau_k^r d_r^k = \tau_k^r u^k{}_{;r}$$

azonosságot, a spontán forrásra a

$$b = (1/T)\tau_k^r u^k{}_{;r} - (q^k/T^2)(T_{,k} + T\alpha_k/c^2) \quad (32)$$

kifejezést kapjuk.

Írjuk be most (32)-be a Stokes-folyadékot jellemző (31), (25) kifejezéseket. Néhány számolás után — alkalmazva közben (I. 6)-ot és (I. 2)-t — a következő végeredményre jutunk:

$$b = (\mu/T)(u^k{}_{;r} u^r{}_{;k} + g^{rs} u^k{}_{;r} u_{k;s}) + (\zeta - 2\mu/3)\Theta^2/T + \\ + \kappa \{ [D(\ln T)]^2/c^2 + g^{kr}(\ln T)_{,k}(\ln T)_{,r} + 2\alpha^k(\ln T)_{,k}/c^2 \} + \\ + (\mu/T + \kappa/c^2)\alpha^k \alpha_k/c^2.$$



c) Az energiasűrűség, a hőáramsűrűség és a hármas feszültségek kifejezése inerciarendszerben

A (21–23) összefüggésekből kiindulva (8), (24) és (25) felhasználásával előállíthatjuk  $w$ ,  $\vec{\varphi}$  és  $\hat{\sigma}$  kifejezését Stokes-folyadéokra. A hosszadalmas, de elemi számítások az alábbi eredményekre vezetnek:

$$\begin{aligned} w &= \gamma^2 \{ \vec{w} + c^{-2} [(p - (\zeta - 2\mu/3)\gamma \vec{\nabla} \vec{v})v^2 - 2\mu\gamma^3 \vec{v}(\vec{\nabla}(v^2/2)) - 2\kappa \vec{v}(\vec{\nabla} \mathcal{T})] - \\ &\quad - c^{-4} [2\mu\gamma^3 v^2 \partial(v^2/2)/\partial t + (\zeta - 2\mu/3)\gamma^3 v^2 d(v^2/2)/dt + 2\kappa(v^2 \partial \mathcal{T}/\partial t + \\ &\quad + \gamma^2 \mathcal{T} \partial(v^2/2)/\partial t)] + c^{-6} [2\kappa\gamma^2 \mathcal{T} v^2 \partial(v^2/2)/\partial t] \}, \\ \vec{\varphi} &= -\kappa \{ \vec{\nabla} \mathcal{T} + c^{-2} [\vec{v} \partial \mathcal{T}/\partial t + \gamma^2 \mathcal{T} (d\vec{v}/dt - \vec{\nabla}(v^2/2))] - c^{-4} [\gamma^2 \mathcal{T} \vec{v} \partial(v^2/2)/\partial t] \}, \\ \hat{\sigma} &= -p\hat{1} + (\zeta - 2\mu/3)\gamma(\vec{\nabla} \vec{v})\hat{1} + \mu\gamma(\vec{v} \circ \vec{\nabla} + \vec{\nabla} \circ \vec{v}) + \\ &\quad + c^{-2} \{ (\zeta - 2\mu/3)\gamma^3 [d(v^2/2)/dt] \hat{1} + \mu\gamma [\gamma^2 \vec{v} \circ (\vec{\nabla}(v^2/2) + d\vec{v}/dt) + \\ &\quad + (\partial \vec{v}/\partial t) \circ \vec{v}] \} + c^{-4} [\mu\gamma^3 \partial(v^2/2)/\partial t] \vec{v} \circ \vec{v}; \end{aligned}$$

itt  $\vec{\nabla}$  a  $\partial/\partial z_i$  vektoroperátor szimbóluma,  $\mathcal{T}$  pedig az abszolút hőmérséklet abban az inerciarendszerben, amelyben a folyadék mozgását leírjuk.  $\mathcal{T}$  a sajátrendszerre vonatkozó hőmérséklettel a

$$\mathcal{T} = \gamma T$$

kapcsolatban áll [14].

## V. MAGNETOHIDRODINAMIKA

### 1. Ideális magnetohidrodinamikai közeg

A konstitutív egyenletekben az elektromágneses térhez kapcsolódó független változók legyenek az  $\mathbf{e}$ ,  $\mathbf{b}$  mennyiségek. A  $\mathbf{d}$ ,  $\mathbf{h}$  és  $\mathbf{k}$  vektorokat megadó anyagi egyenleteket a lehető legegyszerűbb alakban vesszük fel:

$$\mathbf{d} = \bar{\epsilon} \mathbf{e}, \quad (1)$$

$$\mathbf{h} = (1/\bar{\mu}) \mathbf{b}, \quad (2)$$

$$\mathbf{k} = \bar{\sigma} \mathbf{e}, \quad (3)$$

sőt az  $\bar{\epsilon}$ ,  $\bar{\mu}$ ,  $\bar{\sigma}$  skalárokat állandónak tekintjük.

Ideális magnetohidrodinamikai közegnek az olyan perfekt folyadékot nevezzük, amely tökéletes elektromos vezető, azaz  $\bar{\sigma}^{-1} = 0$ . Az ilyen kontinuumban (3) és (1) szerint

$$e_i = d_i = 0,$$

így az elektromágneses tér energiaimpulzus-tenzorára (III. 15)-ből a

$$\theta_i^k = (\bar{\mu}/4\pi) [(\delta_i^k/2 + u_i u^k/c^2) h_r h^r - h_i h^k] \quad (4)$$

formula adódik. Most tehát  $\theta$  szimmetrikus tenzor.



$\mathbf{G}$  és  ${}^+F$  a négyes térerősség- és indukcióvektorokkal a következőképpen fejezhető ki:

$$G_{ik} = (1/c)(u_i d_k - u_k d_i - \eta_{iklm} u^l h^m), \quad (5)$$

$${}^+F_{ik} = (1/c)(u_i b_k - u_k b_i + \eta_{iklm} u^l e^m);$$

e képletek helyességének belátásához elegendő meggyőződni arról, hogy a sajátrendszerben fennállnak. A (III. 23–24) Maxwell-egyenletek eszerint ideális közegre így szólnak:

$$-\eta_{i,lm}^k (u^l h^m)_{;k} = 4\pi C_i, \quad (6)$$

$$(u_i h^k - u^k h_i)_{;k} = 0; \quad (7)$$

( $\eta_{i,lm}^k{}_{;k} = 0$ ). Szorozzuk át (7)-et  $u^i$ -vel, illetve  $h^i$ -vel. Felhasználva (I. 1)-et, (I. 6)-ot és a (III. 14)-ből következő

$$h_i u^i = 0 \quad (8)$$

azonosságot, továbbá alkalmazva a  $h_r h^r = h^2$  jelölést a

$$c^2 h^k{}_{;k} = h_k \alpha^k, \quad (9)$$

$$u^i h_{i;k} h^k + \Theta h^2 + D h^2/2 = 0 \quad (10)$$

egyenleteket kapjuk.

Most az  $f_i = -\theta_{i;k}^k$  összefüggés alapján kiszámítjuk a négyes erősrűsűséget. Vezessük be a  $\bar{p} = \bar{\mu} h^2/8\pi$  rövidítést ( $\bar{p}$ -t mágneses nyomásnak szokás nevezni). Tekintettel (4)-re és (9)-re

$$f_i = -\bar{p}_{,i} - (2/c^2)(\bar{p}\alpha_i + \bar{p}\Theta u_i + u_i D\bar{p}) + \\ + (\bar{\mu}/4\pi)(h_{i;k} h^k + h_i h_k \alpha^k/c^2); \quad (11)$$

ebből (I. 2) és (10) segítségével az

$$f_k u^k = 0 \quad (12)$$

formula nyerhető.

Az ideális magnetohidrodinamikai közeg mozgás- és energiaegyenletét (IV. 15)-ből, illetve (IV. 15')-ből a (11), (12) kifejezések behelyettesítésével kapjuk meg:

$$(n\chi + 2\bar{p})\alpha_i/c^2 + (p + \bar{p})_{,i} + [D(p + 2\bar{p}) + 2\bar{p}\Theta]u_i/c^2 = \\ = (\bar{\mu}/4\pi)(h_{i;k} h^k + h_i h_k \alpha^k/c^2), \quad (13)$$

$$nD\varepsilon + p\Theta = 0. \quad (13')$$

Végül a téregyenletet tárgyaljuk. Írjuk be (III. 6)-ba (I. 26)-ot, majd ejtsük egybe az indexeket: így a invariáns görbületre az

$$R = (8\pi f/c^4)(T_r^r + \theta_r^r)$$

kifejezés áll elő. (4)-ből látható, hogy  $\theta_r^r = 0$ , (IV. 13) szerint pedig  $T_r^r = 3p - n\varepsilon$ . Az elmondottak figyelembevételével a téregyenlet így írható:

$$R_i^k = - (8\pi f/c^4)[(n\chi + 2\bar{p})u_i u^k/c^2 + (n\chi/2 - p + \bar{p})\delta_i^k - \\ - (\bar{\mu}/4\pi)h_i h^k]. \quad (14)$$



A (13), (13'), (II. 8), (I. 1), (7), (14), (IV. 14),  $p=p(n, T)$ ,  $\varepsilon=\varepsilon(n, T)$  rendszer 19 független egyenletet jelent ((13)-nak csak három, (14)-nek csak hat független komponense van). Ezekben a  $g_{ik}(=g_{ki})$ ,  $u_i$ ,  $h_i$ ,  $n$ ,  $T$ ,  $p$ ,  $\varepsilon$ ,  $\chi$  téridő-függvények szerepelnek, összesen 23 ismeretlen, annak megfelelően, hogy a metrikus tenzor csak négy tetszőleges függvény erejéig határozható meg.

A  $C_i$  négyes elektromos áramsűrűséget az egyenletrendszer megoldása után (6)-ból számíthatjuk ki.

## 2. Nem polarizálódó folyadék

Ha az (1), (2) anyagi egyenletekben

$$\bar{\varepsilon} = \bar{\mu} = 1,$$

akkor a sajátrendszerben  $E^i=D^i$ ,  $H^i=B^i$ , és így — mint (III. 7)-ből láthatjuk —

$$F_{ik} = G_{ik}.$$

Ekkor az elektromágneses tér energiaimpulzus-tenzora szimmetrikus:

$$\theta_{ik} = (1/4\pi)[F_{ir}F_{kr} + (1/4)g_{ik}F_{rs}F^{sr}], \quad (15)$$

tehát használhatók a IV. fejezet eredményei.

(15)-ből kiindulva határozzuk meg a négyes erősűrűséget. A

$$4\pi\theta_{i;k}^k = F_{ir;k}F^{kr} + F_{ir}F^{kr}_{;k} + (1/2)F_{rk,i}F^{kr}$$

kifejezésben (III. 23) szerint

$$F^{kr}_{;k} = -(4\pi/c)C^r.$$

Hajtsuk még végre az

$$F_{ir;k}F^{kr} = (1/2)(F_{ir;k} + F_{ki;r})F^{kr}$$

azonos átalakítást, akkor a

$$8\pi(F_{ir}C^r/c - f_i) = (F_{ir;k} + F_{rk;i} + F_{ki;r})F^{kr}$$

formát kapjuk. Viszont — mint a Riemann-geometriából ismeretes — a  $\Phi$  ferdeszimmetrikus tenzorra kirótt

$${}^+\Phi_{i;k}^k = 0$$

egyenletből következik, hogy

$$\Phi_{ir;k} + \Phi_{rk;i} + \Phi_{ki;r} = 0,$$

tehát (III. 24) szerint

$$f_i = F_{ik}C^k/c. \quad (16)$$

Használjuk most föl az (5), (3) kifejezéseket és  $C^i$  felbontását (16) átalakítására, vegyük figyelembe, hogy

$$e_i u^i = 0,$$

és alkalmazzuk az  $e_r e^r = e^2$  rövidítést. Végeredményben az

$$f_i = \bar{q}e_i + (\bar{\sigma}/c^2)\eta_{iklm}e^k h^l u^m + (\bar{\sigma}e^2/c^2)u_i \quad (17)$$



erőformula adódik. A jobb oldali első tag a Lorentz-, a második az Ampère-féle erősűrűség négyes megfelelője. (17)-ből

$$f_k u^k = -\bar{\sigma} e^2,$$

így

$$P_i^k f_k = \bar{\rho} e_i + (\bar{\sigma}/c^2) \eta_{iklm} e^k h^l u^m.$$

A mozgásegyenletben tehát  $(\bar{\sigma} e^2/c^2) u_i$  nem szerepel. Ez a tag az  $f_i$  forrás termikus része [9].

#### IRODALOM

1. Marx Gy., Magyar Fizikai Folyóirat 5, 91, 1957.
2. C. Møller: The Theory of Relativity. Clarendon Press, 1952.
3. M. H. Johnson, Ch. F. McKee, Phys. Rev. D. 3, 858, 1971.
4. P. Yodzis, Phys. Rev. D 3, 2941, 1971.
5. Tihanyi L., Magyar Fizikai Folyóirat 22, 391, 1974.
6. R. A. Grot, A. C. Eringen, Int. J. Engng Sci. 4, 611, 1966.
7. A. Lichnerowicz: Relativistic Hydrodynamics and Magnetohydrodynamics. W. A. Benjamin, Inc. 1967.
8. C. Eckart, Phys. Rev. 58, 919, 1940.
9. Takács Cs., Magyar Fizikai Folyóirat, 25, 175, 1977.
10. G. A. Maugin, J. Phys. A 7, № 4, 1974.
11. L. D. Landau, E. M. Lifshitz: Fluid Mechanics. Pergamon Press, 1959.
12. A. C. Eringen, Int. J. Engng Sci. 4, 179, 1966.
13. A. C. Eringen: A Critical Review of Thermodynamics, 483. Mono Book Corp., 1970.
14. H. Ott, Zs. f. Phys. 175, 70, 1963.



# KLASSZIKUS IRODALOMBÓL

## TWISTOR-ALGEBRA\*

R. PENROSE

Újfajta algebrát írunk le, melynek segítségével ki tudunk fejezni minden konformisan kovariáns vagy Poincaré-kovariáns műveletet a Minkowski-féle téridőben. Ezen algebra elemeit — a twistorokat — olyan szabályokkal kombináljuk, melyek hasonlítanak a tenzorkalkulus szabályaihoz, de a twistorok annyiban különböznek a tenzoroktól és a spinoroktól, hogy irány-tulajdonságokon kívül helyi tulajdonságokat is leírnak. A fényyszerű vonal előállítása kétkomponensű spinor-párral — melyek közül az egyik a vonal irányát definiálja, a másik pedig az origó körüli nyomatékot jelenti — a twistor legegyszerűbb (négy komponensű) típusát szolgáltatja. A twistorok többi típusának származtatására vonatkozó szabályokat a geometria határozza meg. Az egyindexű twistorok a korlátozott konform csoport egy négydimenziós négyértékű („spinor”-) reprezentációját definiálják. A Poincaré-csoport számára bevezetünk egy antiszimmetrikus metrikus twistort. A twistortér meghatároz egy  $C$  komplex projektív hármas-teret, amely az  $M$  Minkowski-féle téridővel egyenértékű másik képet ad ( $M$ -et a végtelenben ki kell egészíteni egy fény-kúppal). A  $C$  pontjainak az  $M$ -ben nulla-vonalak vagy komplexé tett fényyszerű vonalak felelnek meg; a  $C$ -ben levő vonalakat  $M$ -ben valós vagy komplex pontok reprezentálják (így a komplexé tett  $M$  és  $C$ -nek Klein-féle reprezentációja). A twistorok segítségével részletesen tárgyaljuk  $M$  konform transzformációit, ideértve a tér- és időtükrözést (és a komplex konjugációt). Ismertetjük Kerr tételét, mely szerint a  $C$ -ben levő komplex analitikus felületek a nyírásmentes fényyszerű konruenciákat definiálják az  $M$  valós térben. A twistorokat arra használjuk, hogy új tételeket vezessünk le az  $M$  valós geometriájára vonatkozólag. Egy később megjelenő cikkben közöljük a fizikai terek (mezők) általános leírását twistorokkal.

## I. BEVEZETÉS

A Lorentz-féle kovariáns lokális terekre vonatkozó elméletekben a térmennyiségeket (a spinnel együtt) általában vektorok, tenzorok vagy még általánosabban spinorok írják le, mert a Lorentz-csoport<sup>1</sup> minden véges dimenziójú reprezentációja kifejezhető spinorokkal (a vektorokat és a tenzorokat tulajdonképpen speciális esetnek tekintjük). Egy lokális, korlátozott Lorentz-transzformáció ekkor a

$$\Psi_{E...F'}^{A...G'} \rightarrow \Psi_{Q...V'}^{M...S'} t_M^A \dots \bar{t}_{S'}^{G'} t_E^{(-1)Q} \dots \bar{t}_{V'}^{(-1)P'} \quad (1.1)$$

alakban jelenik meg, ahol  $(t_M^A)$  komplex egységdeterminánsú  $2 \times 2$ -es mátrix, amelynek  $(t_M^{(-1)A})$  az inverze. Kivéve azt az esetet, amikor az általános relativitáselméletet kell alkalmazni, általában azt is megköveteljük, hogy a fizikai mennyiségek megfelelően kovariánsak legyenek a teljes Poincaré-csoport<sup>1</sup> szempontjából. Ez a kovarian-

\* Megjelent Journal of Mathematical Physics, 8, 345, 1967.

<sup>1</sup> Ebben a cikkben „Lorentz-csoporton” mindig a hatparaméteres *homogén* csoportot, a „Poincaré-csoporton” a tízparaméteres *inhomogén* csoportot értjük. „Konform csoportnak” azt a tizenöt-paraméteres transzformációs csoportot nevezzük, amely megtartja a Minkowski téridő lokális, konform szerkezetét. Ha bármilyen összefüggésben fontos a tértükrözés-, vagy időtükrözéses transzformációk kizárása, akkor ezt például a „korlátozott” szó használatával tesszük nyilvánvalóvá.



cia azonban (lokálisan) egészen más módon fejeződik ki, mint a Lorentz-kovariancia. A téridőbeli *irány*-függés *algebrai* alakban jelenik meg, (lásd (1.1)), viszont a hely-függést *differentiálegyenletek* írják le (így az (1.1)-gyel analóg formulában integrálok fordulnak elő). Az

$$x^i \rightarrow x^i + a^i \quad (1.2)$$

transzlációval szemben a kifejezések invarianciáját biztosítja általában az a tény, hogy maguk az  $x^i$  (Minkowski-féle) koordináták expliciten sohasem lépnek fel a téregyenletekben, hanem csak a  $\partial/\partial x^i$  operátorok fordulhatnak elő.

Különös, hogy az (1.1) és (1.2) transzformációk — amelyek ésszerűen a Minkowski-féle téridő szimmetriájára utalnak — matematikailag ennyire különböző alakot vesznek fel. És ennek oka nem is abban a különbségben keresendő, ami a Poincaré-csoport transzlációs és rotációs elemeinek csoportstruktúrája között van, hanem inkább annak következménye, amit *lokális térelméleten értünk*. Valójában léteznek<sup>2</sup> matematikai formalizmusok, melyekben *minden* Poincaré-transzformációt egy az (1.1)-hez hasonló algebrai „tenzor-típusú” törvénynek megfelelően állítanak elő. Ennek a cikknek az a célja, hogy bemutasson és tárgyaljon nem túlzottan részletekbe menően egy ilyen formalizmust, melynek elemeit itt *twistoroknak* nevezzük. Látni fogjuk, hogy a twistor-algebra a *konform* csoportra<sup>1</sup> vonatkozóan ugyanolyan típusú egyetemességgel bír, mint van der Waerden<sup>3</sup> jólismert és igen hatékony két-komponensű spinoralgebrája a Lorentz-csoportra vonatkozólag. A twistorok valójában egy olyan hatdimenziós térhez tartozó „spinorok”, amelynek pszeudó-forgási csoportja izomorf a közönséges Minkowski-féle téridő<sup>4</sup> konform csoportjával. A legegyszerűbb (nem skalár) twistorok a *korlátozott konform csoport*<sup>5</sup> egy *négydimenziós, négyértékű reprezentációját* alkotják (ha a tükrözéseket is ideszámítjuk, akkor nyolcdimenziós). Egy általános twistor tehát egy sokindexű mennyiség, amely a fenti alaptwistorokból a szokásos „tenzor-típusú” szabályok segítségével építhető fel. A konform csoport bármely véges dimenziójú reprezentációja így kifejezhető a twistor-reprezentációk<sup>4</sup> direkt összegeként.

Itt a twistorok geometriai oldalát fogjuk kiemelni. Tulajdonképpen teljes képet tudunk adni a twistorokról és alpműveleteikről. A közönséges téridő-fogalmakat át lehet fordítani a twistor-nyelvre. A legegyszerűbb twistor-fogalmaknak azonban egy kissé nemlokális karakterük van. Ezért a legelemibb geometriai objektum a Minkowski-féle téridőben nem pont lesz, hanem a fényszerű egyenes, vagy általá-

<sup>2</sup> Egy ilyen formalizmusra egyszerű például szolgálhat a homogén koordináták használata a téridőben, (fizikai érdekessége persze korlátozott). Több figyelemre tarthat számot az a formalizmus, amelyben a fizikai mennyiségek előállítására a Hilbert-tér segítségével történik, aminek az az előnye, hogy a (végtelen-dimenziójú) megfelelői uniternek. (Lásd különösen E. P. Wigner Ann. Math. 40, 149 (1939); V. Bargmann és E. P. Wigner, Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. 34, 211 (1948).) A tárgyalásnak ezen a fokon azonban lényeges megtartani a műveletek *véges* dimenziójúságát azért, hogy a geometriai kérdéseket szem előtt tarthassuk.

<sup>3</sup> B. L. van der Waerden, Nachr. Ges. Wiss. Göttingen 100 1 (1929).

<sup>4</sup> F. Klein, *Gesammelte Mathem. Abhandlungen* (J. Springer, Berlin, 1921); lásd még H. Weyl, *The Classical Groups* (Princeton University Press, Princeton, New Jersey, 1939); R. Brauer and H. Weyl, Am. J. Math. 57, 425 (1935).

<sup>5</sup> Lényegében twistor-szerű mennyiségeket írt le W. A. Hepner, Nuovo Cimento 26, 351 (1962). Lásd még Y. Murai, Nucl. Phys. 6, 489 (1958); Progr. Theoret. Phys. (Kyoto) 9, 147 (1953); 11, 441 (1954). Hasonló mennyiségek jutottak fontos szerephez például A. Salam, R. Delbourgo és J. Strathdee munkájában, Proc. Roy. Soc. (London) A284, 147, (1965).



nosabban: fényyszerű vonalak nyíró kongruenciája. Tulajdonképpen pontok is előfordulnak, de csak másodlagos szinten. Az is kiderül, hogy a fizikai terek leírása a twistorok nyelvén olyan mennyiségek segítségével történik, amelyeknek nemlokális téridő-interpretációjuk van. Azonban minden vektor-, tenzor- vagy spinor-művelet — ha szükséges — lefordítható a twistorok nyelvére és megfordítva is.

E formalizmus mindegyik alaplóművelete konformisan invariáns. Ez a zérus nyugalmi tömegű terek vizsgálatakor fontos, mert bármely spinre a szabad téregyenletek ténylegesen mind konformisan invariánsak.<sup>6, 7</sup> Az utóbbi tény különösen fontos az ilyen terek<sup>7</sup> aszimptotikus analízisében és úgy látszik, hogy egy „kétségbenvonhatatlanul konformisan invariáns” formalizmus hasznos volna egy ilyen típusú analízis számára. Bár a *tömeg* jelenléte megszünteti a konform invarianciát, úgy tűnik, hogy a konform csoportnak, mint közelítő szimmetriának fontos szerepe van az igen nagy energiájú fizikában.<sup>8</sup> Ha a részecskék energiája elég nagy, nyugalmi tömegük elhanyagolható.

A twistor-formalizmus alkalmazhatósága azonban nem korlátozódik olyan esetekre, amelyeknél a konform csoportnak fontos szerepe van. Mivel a Poincaré-csoport a konform csoportnak egy alcsoportja, a Poincaré-féle kovariáns műveleteket ki tudjuk fejezni twistorokkal. Csúpn egy fix  $I^{a\beta}$  antiszimmetrikus „metrikus twistor” bevezetése szükséges, amely kiválasztja azt a speciális Minkowski-struktúrát, amely az adott konform struktúrának megfelel. Ha az elemi twistorműveletekhez hozzávesszük az  $I^{a\beta}$ -t magukban foglaló műveleteket, akkor a rendelkezésünkre áll egy olyan formalizmus, amely a Poincaré-csoport hatására invariáns és amellyel — elvben bármelyik Poincaré-kovariáns művelet kifejezhető. Sőt, ha  $I^{a\beta}$ -nak az előzőtől kissé eltérő értékeket adunk, akkor a (de Sitter és Einstein-féle kozmológiákat is beleértve) téridők egy osztályához tartozó formalizmusokhoz jutunk.

A twistor-formalizmus talán legszembevetőbb hátránya — a fizikában való *alapvető* alkalmazhatósága szempontjából — az, hogy annyira kötve van a *konformizmus* *sima* téridő gondolatához, hogy nehéz elképzelni, hogyan lehetne e formalizmust (jelen állapotában) teljesen beépíteni az általános relativitáselméletbe. Nem lehetetlen, hogy a twistoralgebra némi módosítással alkalmazható lesz általános, görbült téridőkre. Valóban, a formalizmus egyes alapgondolatainak, nevezetesen azoknak, amelyek a fényyszerű kongruenciákra vonatkoznak (lásd: Robinson és Kerr VIII. pontban említendő eredményeit), eredetüket illetően kapcsolatuk van az általános relativitáselmélettel. Egy ilyen módosításnak azonban egészen más jellegűnek kell lennie, mint — mondjuk — a spinoralgebra — viszonylag egyszerű — alkalmazásának az általános relativitás elméletre.<sup>9</sup> Azt az álláspontot kell nyilván elfogadnunk, hogy míg a vektor-tenzor-spinor-algebra a téridő egy „pontjának” közvetlen környezetére vonatkozik, a twistoralgebra egy tágabb „nemlokális” tartományra. Matematikailag

<sup>6</sup> E. Cunningham, Proc. London Math. Soc. 8, 77 (1910); H. Batemann, *ibid.* 8, 223 (1910); P. A. M. Dirac, Ann. Math. 37, 429 (1936); J. A. McLennan, Jr., Nuovo Cimento 10, 1360 (1956); H. A. Buchdahl, *ibid.* 11, 496 (1959).

<sup>7</sup> R. Penrose, Proc. Roy. Soc. (London) A284, 159 (1965).

<sup>8</sup> H. A. Kastrupp, Phys. Letters (Amsterdam) 3, 78 (1962); Phys. Rev. 142, 1060 (1966). Egy újabb gondolat, hogy az erős kölcsönhatásokkal foglalkozó fizika tömeghasadásai valószínűleg levezethetők a konform csoport szimmetriájából: D. Bohm, M. Flato, D. Sternheimer és J. P. Vigiér, Nuovo Cimento 38, 1941 (1965). A konform csoport fizikai jelentőségéről cikket publikált T. Fulton, F. Rohrlich és L. Witten, Rev. Mod. Phys. 34, 442 (1962).

<sup>9</sup> L. Infeld és B. L. van der Waerden, S. B. Preuss. Akad. 9, 380 (1933).



nehezebbnek látszik az ilyen tartományokat összeállítani egy görbült téridővé, mint pontokból felépíteni egy téridőt.

Végül meg kell röviden említenünk, hogy mi volt az a legfontosabb indíték, ami bennünket egy efféle formalizmus vizsgálatára készítetett, bár ennek a gondolatnak következményeit ebben a cikkben nem fogjuk tárgyalni. A kvantumtérelméleti alkalmazásokról van szó. Az egyik legjelentősebb kvantummechanikai művelet a téramplitúdók felhasadása pozitív és negatív frekvenciájú részekre. Bár ezt általában a Fourier-transzformáltakkal szokták kifejezni, egy másik lehetőség a felső vagy alsó komplex félsíkba<sup>10</sup> való szingularitásmentes analitikus kiterjesztés. Jelen formalizmusban a második közelítést használjuk, kombinálva ezt a komplexszé tett Minkowski-téridő globális tulajdonságaival. Ahogy a valós tengely két nem-összefüggő féltre osztja a komplex síkot, úgy a „nulla”-twistorok tere is (amely a valós Minkowski fényszerű vonalakat írja le) két nem összefüggő féltre osztja a twistor-teret, mégpedig a jobbsodrású és balsodrású twistorokra (mely utóbbiakról feltesszük, hogy a „komplexesített” fényszerű vonalakat írják le). A zérus nyugalmi tömegű és tetszőleges spinű szabad tereket különösen alkalmas leírni twistorokkal. Sőt nagyon egyszerű módon származtathatók ezek a twistor-térben definiált tetszőleges analitikus függvények zárt görbe menti (kontúr) integráljával. (A nulla-tér úgy jön létre, hogy a függvény egy egyszerű pólusát veszi körül a zárt görbe. Ez Robinson<sup>11</sup> egyik tételének bizonyos általánosításához vezet.) Ha e függvény jellegzetes szingularitásai a twistor térnek inkább egyik felével asszociáltak, akkor biztosnak vehetjük, hogy a tér — mondjuk — pozitív frekvenciájú. A zérus nyugalmi tömegű terek egyéb tulajdonságai is természetes módon kifejezhetők twistorokkal, nevezetesen a potenciáلتerek<sup>7</sup> egyes típusai közötti kölcsönös kapcsolat és ezek teljes energia-impulzus-impulzusnyomaték szerkezete (amely egy  $E_\beta^z$  spur-nélküli „hermitikus” twistor tizenöt komponenséből tízet jelent). Ezeknek a részleteknek tárgyalását egy későbbi cikkben fogjuk közölni.

Gondot fordítottunk arra, hogy megmutassuk: a twistoralgebra nemcsak elvont formalizmus, az algebrai műveleteknek jól definiált jelentésük van a téridő-geometria nyelvén. Akár lesz a twistoroknak jelentős szerepe az elméleti fizikában, akár nem, az eddig kapott eredmények hangsúlyozottan arra mutatnak, hogy a formalizmust geometriai és analitikai szempontból egyaránt igen alaposan meg kell vizsgálni.

## II. TWISTOROK ÉS FÉNYSZERŰ VONALAK

Egy twistor geometriai leírására vegyünk először egy  $L$  fényszerű egyenest az  $M$  Minkowski-féle téridőben.  $(x^i)$  legyen a Minkowski-koordináták<sup>12</sup>  $M$ -re vonat-

<sup>10</sup> Lásd bármelyik, a kvantum térelmélettel foglalkozó standard művet. Az itt említett lényeges részek megtalálhatók R. F. Streater és A. S. Wightman, *PCT, Spin and Statistics, and All That*, (W. A. Benjamin, Inc., New York, 1964) című művében.

<sup>11</sup> I. Robinson, *J. Math. Phys.* 2, 290 (1961).

<sup>12</sup> A világ-vektorokat és tenzorokat latin kisbetűs indexszekkel látjuk el, melyek értéke 0, 1, 2 vagy 3 lehet, és a Minkowski-metrikát  $(g^{ij}) = \text{diag}(1, -1, -1, -1)$  adja. A latin nagybetűs indexek — vesszővel vagy vessző nélkül — spinorindexek, és 0, 1 vagy 0', 1' lehetnek. A görög betűk twistorindexek, melyek értéke 0, 1, 2, 3 lehet. Az összegezési konvenció a négyfajta index mindegyikére külön-külön vonatkozik. Így például vesszős és vesszőtlen spinor indexek szerint nem lehet egyidejűleg összegezni, még akkor sem, ha ugyanazt a betűt használjuk, pl.:  $x_{J'}^I$ -ben  $J$ -t és  $J'$ -t két különböző betűnek tekintjük. Ez lehetőséget ad a tenzor-spinor megfeleltetés szabados felírására, ha egy tenzorindex két nagybetűs változatát használjuk spinorjelölésben:  $x^J \leftrightarrow x^{J'}$ , stb. (Rindler-féle konvenció).



kozó összesége  $O$  origóval.  $l^i$  legyen az  $L$ -en levő  $P$  pont helyvektora,  $n^i$  pedig az  $L$ -hez húzott jövőbe mutató érintővektor (lásd az 1. ábrát). Ha az  $L$  vonalhoz koordinátakészletet akarunk rendelni, akkor úgy járhatunk el — Plücker—Grassmann-féle koordináták — hogy kiválasztjuk a ( $P$ -ben ható)  $n^i$  vektorokat és ezeknek  $O$  körüli

$$m^{ij} = l^i n^j - n^i l^j \quad (2.1)$$

nyomatékait. Ekkor a tíz  $(n^i, m^{ij})$  mennyiség hányadosai  $L$ -t egyértelműen fogják definiálni. (Figyeljük meg, hogy ez független attól, hogy az  $L$  melyik  $P$  pontját választottuk.) Ez azonban erősen redundáns reprezentáció. Kiegészítve azt a követelményt, hogy  $n^i$  fényszerű, azaz

$$n^i n_i = 0, \quad (2.2)$$

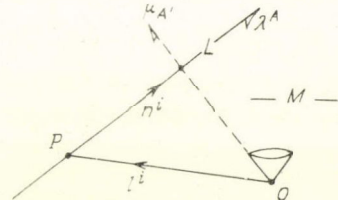
(2.1)-re fennállanak az

$$\varepsilon_{ijkl} m^{ij} n^k = 0 \quad (2.3)$$

konzisztencia-relációk (valamint az is, hogy  $\varepsilon_{ijkl} m^{ij} m^{kl} = 0$ , ami (2.3)-ból következik). A (2.3) valójában három független feltételt foglal magában, amelyek (2.2)-vel együtt az  $(n^i, m^{ij})$ -ben levő kilenc viszonyt öt független valós számra redukálják. Ez összhangban van azzal a ténnyel, hogy az  $M$ -ben levő fényszerű vonalak  $\infty^5$  rendszert alkotnak (mert, ha  $P$ -t úgy tekintjük, mint  $L$ -nek egy adott térszerű hiperfelülettel való metszését, akkor  $P$ -re  $\infty^3$ , a  $P$ -nél levő fényszerű irányra pedig  $\infty^2$  számú választás áll rendelkezésünkre).

$L$  fényszerű volta mostanáig nem játszott lényeges szerepet. Ilyen irányokat igen alkalmas kétkomponensű spinorokkal előállítani. Kiderül, hogy az  $L$  fényszerű vonalak leírását nagymértékben leegyszerűsíthetjük, ha spinorokat használunk; a (2.2) és (2.3)-ban foglalt négy feltétel ugyanis egyetlen feltétellel helyettesíthető. Mivel a most következő tárgyalás lényegesen függ a spinorok használatától, előbb rövid áttekintést adunk a szükséges alapfoglatokról.<sup>13</sup> A világtenzorokról a spinorokra való átterés a  $\sigma_i^{JJ'}$  mennyiség<sup>12</sup> (ami minden  $j$ -re kétszer kettes hermitikus mátrix) és  $\sigma_{JJ'}$  inverze segítségével történik, és érvényes rájuk, hogy  $\sigma_i^{JJ'} \sigma_k^{KK'} \varepsilon_{JK} \varepsilon_{J'K'} = g_{ik}$ ,  $\sigma_j^{JJ'} \sigma_{JJ'}^i = \delta_j^i$ . Az  $\varepsilon_{JK}$ ,  $\varepsilon_{J'K'}$  antiszimmetrikus Levi—Civita-féle szimbólumok, melyek arra szolgálnak, hogy a spinorindexeket segítségükkel felhúzzuk vagy levonjuk  $\xi^A \varepsilon_{AB} = \xi_B$ ,  $\varepsilon^{AB} \xi_B = \xi^A$ , azaz  $\xi^0 = \xi_1$ ,  $\xi^1 = -\xi_0$  és ugyanígy a vesszős indexekre. Bármely tenzornak (pl. az  $X_k^{ij}$ -nak) van egy spinor megfelelője, amelyet úgy írunk fel, hogy vesszük ugyanazt az alapszimbólumot, de mindegyik tenzorindexet helyettesítjük a megfelelő spinorindexpárral, például

$$X_k^{ij} \leftrightarrow X^{II' JJ' KK'} = X_{kk'}^{ij} \sigma_i^{II'} \sigma_{j'}^{JJ'} \sigma_k^{KK'}.$$



1. ábra. Fényszerű vonal ábrázolása

<sup>13</sup> Teljesebb leírás található a 3. és a 9. lábjegyzetben, valamint pl. W. L. Bade és H. Jehle. Rev. Mod. Phys. 25, 714 (1953); E. M. Corson: *An introduction to tensors, spinors and relativistic wave equations* (Blackie and Son Ltd., London, 1953); F. A. E. Pirani, a *Brandeis Summer Institute in Theoretical Physics*, 1964, *Lectures on general relativity* (Prentice-Hall Inc., Englewood Cliffs, New Jersey, 1965), Vol. 1. című munkákban.



Komplex konjugáció hatására a vesszős és a vesszőtlen indexek szerepe felcserélődik és így a tenzorok valós voltának a spinorok hermetikussága felel meg. Mivel  $M$  görbületben,  $\sigma_i^{JJ'}$ -t konstansnak választhatjuk, mégpedig az egységmátrix és a Pauli-féle mátrixok  $2^{-1/2}$ -szeresének. Ekkor, mondjuk

$$(x^0, x^1, x^2, x^3) \leftrightarrow \begin{pmatrix} x^{00'} & x^{01'} \\ x^{10'} & x^{11'} \end{pmatrix} = 2^{-1/2} \begin{pmatrix} x^0 + x^1 & x^2 + ix^3 \\ x^2 - ix^3 & x^0 - x^1 \end{pmatrix}. \quad (2.4)$$

Az  $\alpha^j$  komplex fényszerű vektor (azaz  $\alpha^j \alpha_j = 0$ ) spinormegfelelője

$$\alpha^j \leftrightarrow \alpha^{JJ'} = \beta^J \gamma^{J'} \quad (2.5)$$

alakú lesz. Ha  $\alpha^j$  valós és jövőbe mutató, akkor  $\gamma^{J'}$  gyanánt vehetjük  $\beta^J$  komplex konjugáltját, azaz

$$\alpha^j \leftrightarrow \beta^J \bar{\beta}^{J'}. \quad (2.6)$$

A (2.6) egyenletből következik egy  $\beta^J$  spinor geometriai előállítása jövőbe mutató fényszerű vektorként, eltekintve egy fázisszorozótól. Sőt,  $\beta^J$ -t az *előjeltől* eltekintve geometriailag<sup>14</sup> teljesen meghatározhatjuk a

$$\pi^{jk} \leftrightarrow \beta^J \beta^K \varepsilon^{J'K'} + \varepsilon^{JK} \bar{\beta}^{J'} \bar{\beta}^{K'} \quad (2.7)$$

bivektor segítségével. Ez valós (és nulla) és meghatároz egy *félsík-elemet*, amely az  $\alpha^j$  vektor mentén érinti a fénykúpot.  $\beta^J$  előjelét azonban *lokálisan*<sup>15</sup> nem tudjuk geometriailag megadni, mert egy  $2\pi$ -vel való folytonos forgás  $\beta^J$ -t  $-\beta^J$ -be viszi át. Ha  $\beta^J$  csak egy *arányossági faktortól eltekintve* érdekel bennünket, akkor a teljes geometriai előállítás nem más, mint egy fényszerű *irány*.

Állítsuk most elő a spinorok nyelvén az  $n^i$  és  $m^{ij}$  mennyiségeket, amelyek az  $L$  fényszerű vonalat definiálják. Tudjuk, hogy

$$n^j \leftrightarrow n^{JJ'} = \lambda^J \bar{\lambda}^{J'} \quad (2.8)$$

(2.1)-ből pedig

$$m^{jk} \leftrightarrow l^{JJ'} \lambda^K \bar{\lambda}^{K'} - \lambda^J \bar{\lambda}^{J'} l^{KK'} = i \varepsilon^{JK} \mu_{(J'} \bar{\lambda}^{K')} - i \mu^{(J} \lambda^{K)} \varepsilon^{J'K'}, \quad (2.9)$$

ahol

$$\mu_{A'} = -i \lambda^A l_{AA'}. \quad (2.10)$$

(A kerek zárójelek a szimmetrizálást jelentik. A  $-i$  faktor a későbbiek kedvéért szerepel.) Tehát  $\lambda^A$  és  $\mu_A$  együtt definiálják  $l^i$ -t és  $m^{jk}$ -t. Úgy vehetjük, hogy  $\lambda^A$  meghatározza  $L$  irányát,  $\mu_A$  pedig  $\lambda^A$ -nak ( $P$ -ben ható)  $O$ -ra vonatkozó *nyomatékát*. (2.10)-ből világos, hogy ha  $\lambda^A$ -t megszorozzuk valamilyen komplex faktorról, akkor — ha  $\mu_A$ -t is megszorozzuk ugyanezzel a faktorról —  $L$  változatlan marad. (2.10)-ből

<sup>14</sup> E. T. Whittaker, Proc. Roy. Soc. (London) A158, 38 (1937); W. T. Payne, Am. J. Phys. 20, 253 (1952); R. Penrose, „Null Hypersurface Initial Data” P. G. Bergmann Aeronautical Research Lab. Tech. Documentary Rept. 63—56. (Office of Aerospace Research, U. S. Air Force, 1963) című sorozatában.

<sup>15</sup> Ha egy spinor pontos definícióját akarja valaki megadni — számításba véve annak előjelét is — akkor a „rostnyaláb” (fiber bundle) elméletet szokták segítségül hívni. Ez azonban nem szükséges és R. Penrose és W. Rindler a spinoroknak a relativitáselméletben való alkalmazásáról szóló megjelenés alatt álló könyvének egyik függelékében ennek elemi (nem lokális) geometriai leírását közlik.



az is következik, hogy  $\mu_{A'}$  független attól, hogy az  $L$  egyenes melyik  $P$  pontját választottuk (ez azt jelenti, hogy ha:  $l_{AA'} \rightarrow l_{AA'} + \lambda \lambda_A \bar{\lambda}_{A'}$ , akkor  $\mu_{A'}$  nem változik, mivel  $\lambda^A \lambda_A = 0$ ).

Érdeklődésre tarthat számot  $P$  speciális megválasztásának egy esete, nevezetesen, ha  $P$ -t az  $L$  fényszerű vonal és az  $O$  fénykúp metszésében vesszük fel. (Ez a metszés egyértelműen létezik, ha  $L$  nem fekszik benne az  $O$ -n áthaladó egyik fényszerű hipersíkban sem.) Ekkor  $l^j$  vagy  $-l^j$  alakja megfelel (2.6)-nak, (2.10)-ből következik, hogy

$$l_{AA'} = i(\lambda^B \bar{\mu}_B)^{-1} \bar{\mu}_A \mu_{A'}. \quad (2.11)$$

Így a  $\mu_{A'}$ -val definiált fényszerű irány [lásd (2.6)-ot] az az  $O$ -n átmenő nulla-irány, amely átszeli  $L$ -et (1. sz. ábra). Az a kivételes eset, mikor  $\lambda^E \bar{\mu}_E = 0$ , egy olyan  $L$ -nek felel meg, amely egy  $O$ -n áthaladó fényszerű hipersíkban fekszik. [Ez (2.10)-ből következik, mivel  $n^j$  szükségképpen orthogonális bármelyik  $l_j$ -re.] Ebben az esetben  $\lambda^A$  és  $\bar{\mu}^A$  arányosak, így  $\mu_{A'}$  fényszerű iránya megegyezik  $L$ -ével. Még ennél is ritkábban fordul elő, hogy  $L$  átmegy  $O$ -n. Ez a  $\mu_A = 0$ -nak megfelelő eset. A  $\lambda^A = 0$  esetet pillanatnyilag kizárjuk (vizsgálatára azonban röviden visszatérünk).

Az  $L$  fényszerű vonal koordinátáinak vehetjük

$$L^0 = \lambda^0, L^1 = \lambda^1, L^2 = \mu_0, L^3 = \mu_1 \quad (2.12)$$

négy komplex mennyiség három komplex hányadosát, amit így írhatunk:

$$(L^x) = (\lambda^A, \mu_{A'}). \quad (2.13)$$

Ez a három komplex viszony ekvivalens *hat* valós paraméterrel; így várható, hogy fogunk találni egy  $\lambda^A$ -t és  $\mu_{A'}$ -t összekapcsoló valós relációt. Ez (2.10)-ből állítható elő, mert az  $l^j$  vektor *valós* voltából következik, hogy  $l_{AA'}$  hermitikus és ebből

$$\text{Re}(\lambda^A \bar{\mu}_A) = 0 \quad (2.14)$$

Ha  $\lambda^A$  nem egyenlő zérussal, akkor a (2.14) feltétel is *elégleges* annak biztosítására, hogy a  $\lambda^A$  és  $\mu_{A'}$ -val asszociált  $L$  fényszerű vonal létezzék. Ez azért van így, mert ha  $\lambda^A \bar{\mu}_A$  tisztán képzetes és el nem tűnő mennyiség, akkor (2.11) meghatároz egy  $P$  pontot, amelyen keresztülhaladó  $L$  vonalak közül kiválaszthatjuk azt, melynek irányát  $\lambda^A$  meghatározza. Ha pedig  $\lambda^A \bar{\mu}_A = 0$ , akkor  $P$  meghatározására (2.10) könnyen megoldható a térszerű  $OP$ -vel. ( $\lambda_A \bar{v}_A + v_A \bar{\lambda}_{A'}$  alakú  $l_{AA'}$ .)

A (2.13)-ban adott  $(L^x)$  komponensekkel bíró mennyiségeket *nulla-twistoroknak* fogjuk nevezni (ezek valenciája  $\begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}$ ), ha (2.14) fennáll.<sup>16</sup> Ezek a mennyiségek akkor is érdekesek lesznek számunkra, ha (2.14) *nem* érvényes (és akkor is, ha megengedjük, hogy  $\lambda^A$  eltűnjék). Bizonyos értelemben ez a mennyiség egy komplexszé tett fényszerű vonalat ír le [ha (2.14) nem teljesül], mert ha megengedjük, hogy  $l^i$  komplex vektor legyen, akkor (2.14) érvényessége általában sérülni szokott. [Itt tulajdonképpen nem az  $M$ -ben levő fényszerű vonalak közönséges értelemben vett egyszerű komplexesítéséről van szó, mivel a vonalrendszer valós dimenziószáma (2.14) elejtésével ötről hatra nőtt; de lásd a VI. pontot.] Ha  $\text{Re}(\lambda^A \bar{\mu}_A) > 0$ ,  $L$ -t *jobbsodrású twistor*nak

<sup>16</sup> Minden olyan gondolatot, ami arra irányul, hogy a (2.13) twistort a Dirac-spinorral azonosítsuk, — transformációs tulajdonságaik teljesen különböző volta miatt — el kell itt vetnünk [lásd pl. (7.13)-t és (7.17)-et].



fogjuk nevezni (valenciája  $\begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}$ ), ha pedig  $Re(\lambda^A \bar{\mu}_A) < 0$ , akkor *balsodrású twistornak*. E kifejezések választásának oka később világos lesz.  $L^\alpha$ -t akkor is *nulla-twistornak* nevezzük, ha  $\lambda^A = 0$ , bár ez semmilyen véges  $L$  fényszerű vonalat nem állít elő. Ezeknek a twistoroknak a szerepe hamarosan meg fog mutatkozni.

### III. FÉNYSZERŰ VONALAK TALÁLKOZÁSA TWISTOROKKAL KIFEJEZVE

A fényszerű vonalak találkozása szolgál a twistorok kezelésére vonatkozó algebrai szabályok alapjául. Az  $L$ -en kívül vegyünk egy második,  $X$  fényszerű vonalat, amelyet az  $X^\alpha$  nullatwistor ír le:

$$(X^\alpha) = (\xi^A, \eta_{A'}), \quad (3.1)$$

ahol  $\xi^A$  és  $\eta_{A'}$  a fentebb szereplő  $\lambda^A$  és  $\mu_{A'}$  megfelelője. Tehát  $\xi^A$  meghatározza  $X$  irányát és

$$\eta_{A'} = -i\xi^A x_{AA'}, \quad (3.2)$$

ahol  $x^i$  az  $X$  egy pontjának helyvektora (lásd a 2. ábrát). Tegyük fel, hogy  $X$  és  $L$  metszik egymást. Ebben az esetben az  $l^i = x^i$ -t választhatjuk ezen metszéspont koordináta-vektorának, ahonnan (2.10) és (3.2) alapján

$$\xi^A \bar{\mu}_A = i\xi^A l_{AA'} \bar{\lambda}^{A'} = i\xi_{AA'} \bar{\lambda}^{A'} = -\eta_{A'} \bar{\lambda}^{A'}. \quad (3.3)$$

Az  $L^\alpha$  twistor *konjugált komplexe* legyen az a  $\begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}$  valenciájú  $\bar{L}_\alpha$ , amelyre

$$(\bar{L}_\alpha) = (\bar{\mu}_A, \bar{\lambda}^{A'}), \quad (3.4)$$

ha  $L^\alpha$ -t (2.13) szolgáltatja [tekintet nélkül a (2.14) feltételre vagy arra, hogy  $\lambda^A$  eltűnik-e vagy sem]. Komponensekkel kiírva:<sup>17</sup>

$$\bar{L}_0 = \bar{L}^2, \bar{L}_1 = \bar{L}^3, \bar{L}_2 = \bar{L}^0, \bar{L}_3 = \bar{L}^1. \quad (3.5)$$

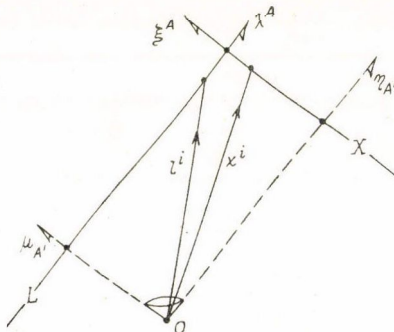
Ekkor (3.3)-ból következik, hogy  $L$  és  $X$  metszésének feltétele megfelelő twistoraikkal kifejezve

$$X^\alpha \bar{L}_\alpha = 0, \quad (3.6)$$

mert

$$X^\alpha \bar{L}_\alpha = \xi^A \bar{\mu}_A + \eta_{A'} \bar{\lambda}^{A'}. \quad (3.7)$$

Megjegyzendő továbbá, hogy  $L^\alpha$ -ra vonatkozó (2.14) feltétel akkor állít elő valós fényszerű



2. ábra. Két fényszerű vonal találkozása

<sup>17</sup> A twistorokra (vagy spinorokra) vonatkozó komplex konjugáció műveletét az alapszimbólum fölé írt vonallal jelöljük, ami az indexek fölé már nem nyúlik. Ha ez a vonal az indexek fölé is folytatódik, akkor ez egyszerűen a szimbólum által jelölt komplex szám konjugált komplexét jelenti.



vonalat, ha egyszerűen

$$L^\alpha \bar{L}_\alpha = 0. \quad (3.8)$$

(3.8)-at (3.6) speciális esetének tekinthetjük, mivel  $L$  önmagát metszi! Az is fennáll, hogy itt

$$X^\alpha \bar{X}_\alpha = 0. \quad (3.9)$$

Megfordítva, a (3.6) feltétel is *elégleges* ahhoz, hogy az  $L$  és  $X$  nulla-vonalak messék egymást, és itt egy pillanatra föltesszük, hogy  $\lambda^A$  és  $\xi^A$  nem arányosak és így  $L$  és  $X$  nem párhuzamosak. Ekkor ugyanis  $\xi^A \lambda_A \neq 0$ , és a

$$p_j \leftrightarrow p_{JJ'} = (i/\xi^A \lambda_A)(\lambda_J \eta_{J'} - \xi_J \mu_{J'}) \quad (3.10)$$

(komplex) vektor építhető fel. Megjegyezzük, hogy

$$\mu_{A'} = -i\lambda^A p_{AA'}, \quad \eta_{A'} = -i\xi^A p_{AA'}.$$

Így, ha  $p_j$  *valós* (2.10)-et és (3.2)-t ki tudjuk elégíteni, ha  $l_j = p_j = x_j$ -t helyettesítünk, amiből következik, hogy  $L$  és  $X$  metszi egymást. (A későbbiekben látni fogjuk, hogy a  $p^j$  helyvektorral rendelkező „komplex pontot” tulajdonképpen akkor is jogosan tekinthetjük  $L$  és  $X$  metszéspontjának, ha  $p_j$  nem valós.) Most  $p_j$  akkor és csak akkor valós, ha  $p_{JJ'}$  hermitikus. Mivel  $\lambda^A$  és  $\xi^A$  nem arányosak,  $p_{JJ'}$  hermitikus voltát úgy vizsgálhatjuk meg, hogy vesszük a  $\lambda^A$ -ra és  $\xi^A$ -ra vonatkozó komponenseket:

$$\lambda^A \bar{\lambda}^{A'} (p_{AA'} - \bar{p}_{A'A}) = i\mu_{A'} \bar{\lambda}^{A'} + i\lambda^A \bar{\mu}_A = iL^\alpha \bar{L}_\alpha,$$

$$\xi^A \bar{\xi}^{A'} (p_{AA'} - \bar{p}_{A'A}) = i\eta_{A'} \bar{\xi}^{A'} + i\xi^A \bar{\eta}_A = iX^\alpha \bar{X}_\alpha,$$

$$\xi^A \bar{\lambda}^{A'} (p_{AA'} - \bar{p}_{A'A}) = i\eta_{A'} \bar{\lambda}^{A'} + i\xi^A \bar{\mu}_A = iX^\alpha \bar{L}_\alpha.$$

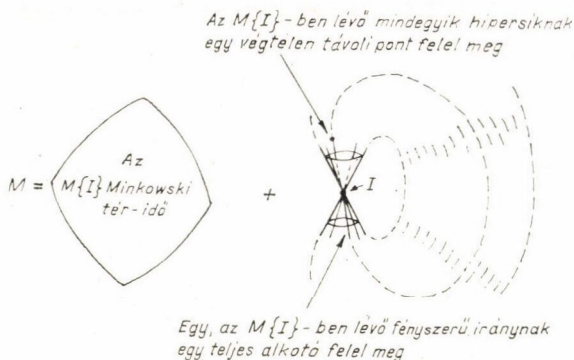
Így  $p_i$  valós volta (3.8), (3.9) és (3.6) következménye lesz úgy, hogy nem párhuzamos fényszerű vonalakat előállító twistorok esetében a vonalak találkozásának feltételét egyszerűen a twistorok között fennálló (3.6) ortogonalitási feltétellel fejezhetjük ki.

Kérdezhetjük továbbá, hogy mi a geometriai jelentése ennek az  $X^\alpha \bar{L}_\alpha = 0$  feltételnek, ha  $X$  és  $L$  valós párhuzamos fényszerű vonalak. Az eredmény bemutatásának legegyszerűbb módja talán az, ha egy határesetet tekintünk.  $L_\alpha$ -t rögzítjük, de  $X^\alpha$ -t változtatjuk, hogy  $X^\alpha \bar{L}_\alpha = 0$  fennáll a mozgás egész tartama alatt. Tegyük fel, hogy  $L$  és  $X$  kezdetben nem párhuzamosak, de határesetben azzá válnak. A metszéspont  $L$  mentén a végtelen felé távolodik.  $X$  lehetséges helyzetei, a metszéspont minden egyes *véges* helyzetére vonatkozólag e ponthoz tartozó fénykúp alkotói. Ha a pont a végtelen felé tart, a fény-kúp határesetben az  $X$ -en átmenő fényszerű hipersíkba megy át. Így ha  $L$  és  $X$  párhuzamosak,  $X^\alpha \bar{L}_\alpha = 0$  annak lesz feltétele, hogy  $L$  és  $X$  *ugyanabban a fényszerű hipersíkban fekszenek*.

Egy fényszerű hipersíkban fekvő fényszerű vonalakat igen alkalmas úgy tekinteni, mint amelyek egyetlen *végtelen távoli pontban* metszik egymást. Ezért  $M$  terünkhöz hozzácsatoljuk e végtelen távoli pontoknak egy  $\infty^3$  számosságú halmazát, [az  $M$ -ben levő nulla hipersíkok mindegyikéhez egyet-egyet]. Az  $L_\alpha$  twistorok geometriai szerepe  $\lambda^A = 0$  (de  $\mu_{A'} \neq 0$ ) esetén most jön előtérbe. Ugyanis, ha  $\lambda^A = 0$ , az  $X^\alpha \bar{L}_\alpha = 0$ -ból  $\xi^A \bar{\mu}_A = 0$  lesz [lásd (3.7)-et]. Ez azt jelenti, hogy  $X$  *iránya egybeesik a  $\mu_{A'}$ -vel jelölt fényszerű iránnyal*; így, ha  $L$ -t rögzítjük, a megfelelő  $X$  vonalak mind párhuzamosak lesznek. Az  $X$  párhuzamos vonalak mindegyik fényszerű hipersíkja a végtelenben *egy* pontot ad; mindezen párhuzamos hipersíkoknak megfelelő végtelen



távoli pontok összesége a végtelenben egy  $\infty^1$  számosságú pontrendszert szolgáltat, mégpedig a *végtelenbeli  $L$  fényszerű vonal* pontjait. Hogy teljes legyen a kép, még egy végtelen távoli  $I$  pontot fel kell vennünk, amely egyik végesben fekvő vonalon sem fekszik. Ez az  $I$  pont az összes végtelenben fekvő  $L$  vonal közös pontja. Itt a következetesség érdekében fel kell tennünk, hogy a végtelenben bármely két fényszerű vonal metszi egymást, ami (3.7)-ből következik, mivel  $\lambda^A=0$ , valamint  $\xi^A=0$  esetén  $X^a L_a=0$  automatikusan fennáll. Ekkor az  $I$  pont egy *olyan végtelenben fekvő fénykúp csúcspontjának szerepét játssza*, melynek alkotói a fentebb tárgyalt (lásd a 3. ábrát) végtelen távoli egyenesek.



3. ábra. Az  $M$  kompakt sokaság szerkezete

Az ily módon előállított „kompakttá” tett, kiegészített Minkowski-tér — amelyhez egy végtelenben fekvő (zárt) fénykúp tartozik — szerkezetét már több szerző tárgyalta.<sup>18, 7</sup> Ezután az  $M$  szimbólumon a *teljes*, kiegészített teret fogjuk érteni, nemcsak a véges pontok halmazát. Az utóbbit majd  $M\{I\}$  jelöli, utalással arra, hogy az adott  $I$  ponthoz tartozó nulla-kúpot kivettük  $M$ -ből.  $M$  geometriája röviden a következő:  $M$  kompakt, nem szinguláris határtalan sokaság, melynek mindenütt jól definiált konform szerkezete van (azaz egy meghatározott metrikája egy arányossági tényezőtől eltekintve). Rendelkezik egy, a konform szerkezetet megtartó  $\infty^{15}$  számosságú tranzitív mozgáscsoporttal; minden pontja az összes többi ponttal azonos környezetben van.  $M$ -ben  $\infty^5$  számú fényszerű „egyenes” vonal (geodetikus vonal) van, amelyek topológiailag körök.  $M$  minden egyes  $P$  pontján  $\infty^2$  számú ilyen vonal halad át és hozzá létre a  $P$  ponthoz tartozó (zárt) fény-kúpot. Ha bármelyik fénykúpot eltávolítjuk, az euklideszi topológiában űr marad, amelyhez egy (a dilatációtól eltekintve egyértelmű), az adott konform szerkezettel konzisztens Minkowski-metrika rendelhető. A teljes  $M$  tér topológiája  $S^3 \times S^1$  és úgy állítható elő, mint egy valós, projektív, másodrendű, négydimenziós sokaság, melynek előjelezése  $(+ + - - -)$ .

<sup>18</sup> N. H. Kuiper, Ann. Math. 50, 916 (1949); H. Rudberg, disszertáció, University of Uppsala, Uppsala, Sweden (1958); R. Penrose előadása a *Proceedings of the 1962 conference on relativistic theories of gravitation*-ben, Warsaw (Polish Academy of Science, Warsaw, 1965) A. Uhlmann, Acta Phys. Polon. 24, 293 (1963). Rudberg is említi a spinorok négy-értékűségét.



Az  $M$ -ben levő fényszerű vonalak kölcsönösen és egyértelműen megfelelnek azon  $L^\alpha$  twistorok arányossági osztályainak (vagyis  $\propto L^\alpha$  ugyanazt a vonalat állítja elő, mint  $L^\alpha$ ;  $\propto \neq 0$ ), amelyek kielégítik az  $L^\alpha \bar{L}_\alpha = 0$  és az  $L^\alpha \neq 0$  feltételeket. Az  $M$ -ben levő fényszerű vonalak közötti incidencia (hajlás) a nekik megfelelő twistorok orthogonalitásaként ( $X^\alpha \bar{L}_\alpha = 0$ ) fejeződik ki.

#### IV. ROBINSON NYALÁBOK

A twistorok leírásában mind ez ideig a  $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$  valenciájú nullatwistorok esetére szorítkoztunk. Ha azonban  $L^\alpha \bar{L}_\alpha \neq 0$ , akkor — mint fentebb már említettük —  $L_\alpha$ -t bizonyos értelemben úgy tekinthetjük, mint egy fajta „komplexesített”  $L$  fényszerű vonalat. Tulajdonképpen ez az a mód, ahogy egy  $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$  valenciájú általános twistort „geometriailag” ábrázolni szándékoztunk. Fontos azonban tudni, hogy a fényszerű vonalak nyalábjaival<sup>19</sup> sokkal pontosabb előállítás is lehetséges. Egy ilyen kongruencia véleményünk szerint, inkább egy  $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$  valenciájú (pl.  $\bar{L}_\alpha$ ) twistort állít elő, bár ez gyakorlatilag csekély különbséget jelent.

Mármint egy  $M$ -ben levő tetszőleges (valós)  $L$  fényszerű vonal tökéletesen jellemezhető az öt metsző fényszerű vonalak teljes rendszerével. Azaz — a twistorok nyelvén szólva — ha ismerjük az  $X^\alpha \bar{L}_\alpha = 0$  és  $X^\alpha \bar{X}_\alpha = 0$  egyenleteket (ahol  $L^\alpha \bar{L}_\alpha = 0$ ,  $L^\alpha \neq 0$ ) kielégítő összes  $X^\alpha$ -t, akkor ismerjük  $L^\alpha$ -t is egy arányossági tényezőtől eltekintve. Tehát míg  $L^\alpha$  az  $M$ -ben levő  $L$  fényszerű vonalakat írja le, addig  $\bar{L}_\alpha$  azon fényszerű vonalak  $L$  nyalábját (vagyis az  $M$ -ben levő vonalak háromdimenziós rendszerét)<sup>19</sup>, amely metszi  $L$ -t. Pontosan így állíthatunk elő egy  $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$  valenciájú  $R_\alpha$  általános twistort az  $X$  vonalak  $R$  nyalábjával, ha az  $X^\alpha$  twistorok ( $X^\alpha \bar{X}_\alpha = 0$  esetén) kielégítik az  $X^\alpha R_\alpha = 0$  egyenletet. Az ilyen nyalábot, ha  $R_\alpha \bar{R}^\alpha \neq 0$ , itt Robinson-nyalábnak fogjuk hívni.<sup>20</sup> (Ha  $R^\alpha \bar{R}_\alpha = 0$ , akkor  $\bar{R}$ -sal jelöljük azt a vonalat, amelyet az  $R$  nyaláb összes vonala metsz. Ha pedig  $L$  jelöli a vonalat, akkor  $\bar{L}$  jelöli a neki megfelelő kongruenciát. Elfogadjuk azt a konvenciót, hogy a szimbólum fölé írt vonás a szimbólum inverzét jelenti. Ebből következik, hogy — adott  $R_\alpha$  mellett —  $\bar{R}_\alpha$  definíciója éppen tükörképe — adott  $L^\alpha$  mellett — az  $\bar{L}_\alpha$ -ra vonatkozó (3.5) definíciónak, mert  $L^\alpha$  helyett  $R^\alpha$ -t írhatnánk. Tehát<sup>17</sup>,  $(\bar{R}^\alpha) = (\bar{R}^0, \bar{R}^1, \bar{R}^2, \bar{R}^3) = (\bar{R}_2, \bar{R}_3, \bar{R}_0, \bar{R}_1)$ .) Ha  $R_\alpha \bar{R}^\alpha > 0$ , akkor az  $R$  Robinson-nyalábot „jobbsodrásúnak”, ha  $R_\alpha \bar{R}^\alpha < 0$ , akkor „balsodrásúnak” nevezzük.

Mivel a twistorok geometriájában a Robinson-nyalábok ilyen alapvető szerepet játszanak, érdemesnek látszik részletesen megvizsgálni itt egy adott nyalábot. (Tulajdonképpen bármelyik speciális eset tökéletesen képviseli az általános esetet, mert kiderül, hogy bármely két Robinson-nyaláb — esetleg egy tükrözést magában foglaló — Poincaré-transzformációval egymásba transzformálható.)

<sup>19</sup> „nyaláb” (kongruencia) kifejezést a görbék (vagy felületek, stb.) olyan rendszerének megnevezésére szokták használni, melynek csak egy (vagy legfeljebb megszámlálható sok) olyan tagja van, amely a tér egy általános pontján átmegy.

<sup>20</sup> Először I. Robinson vizsgálta (magánközlés alapján).



Legyen  $\varepsilon$  egy valós szám és

$$(R_\alpha) = (\varepsilon/\sqrt{2}, 0; 1, 0) \quad (4.1)$$

és így

$$R_\alpha \bar{R}^\alpha = \varepsilon \sqrt{2}. \quad (4.2)$$

Mint (3.1)-ben, legyen:  $(X^\alpha) = (\xi^0, \xi^1, \eta_{0'}, \eta_{1'})$ , így annak a feltétele, hogy az  $X$  vonal az  $R$  nyalábhoz tartozzék, a következő:

$$\xi^0 \varepsilon / \sqrt{2} + \eta_{0'} = 0. \quad (4.3)$$

Az  $X$ -en levő pont  $x^j$  helyvektorát írjuk fel

$$x^0 = t, \quad x^1 = z, \quad x^2 = x, \quad x^3 = y$$

alakban. A (3.2) és (2.4) egyenletekből

$$(\eta_{0'}, \eta_{1'}) = -(i/\sqrt{2})(\xi^0, \xi^1) \begin{pmatrix} t-z & -x+iy \\ -x-iy & t+z \end{pmatrix}.$$

(4.3)-ból így azt kapjuk, hogy  $-\varepsilon \xi^0 = i \xi^0 (-t+z) + i \xi^1 (x+iy)$ , azaz

$$\xi^0 : \xi^1 = x + iy : t - z + i\varepsilon. \quad (4.4)$$

Most  $\xi^J \bar{\xi}^{J'}$  az  $X$ -hez húzott érintő vektort jelenti és így

$$\begin{pmatrix} \xi^0 \bar{\xi}^{0'} & \xi^0 \bar{\xi}^{1'} \\ \xi^1 \bar{\xi}^{0'} & \xi^1 \bar{\xi}^{1'} \end{pmatrix} \propto \begin{pmatrix} dt+dz & dx+idy \\ dx-idy & dt-dz \end{pmatrix}.$$

Ha ezt (4.4)-gyel kombináljuk, megkapjuk az  $X$  vonal differenciálegyenletét

$$\begin{aligned} dt+dz : dx-idy &= dx+idy : dt-dz \\ &= x+iy : t-z+i\varepsilon. \end{aligned} \quad (4.5)$$

Ennek megoldása

$$\begin{aligned} t-z+i\varepsilon &= (x+iy)\alpha \\ (x-iy) - (t+z)\alpha &= \beta, \end{aligned} \quad (4.6)$$

ahol  $\alpha$  és  $\beta$  komplex állandók, amelyek az  $R$  nyaláb egy adott  $X$  egyenesét definiálják és amelyek konzisztencia-okokból kielégítik az

$$\text{Im}(\bar{\beta}\alpha) = \varepsilon \quad (4.7)$$

feltételt. Hogy a helyzetről jobban elképzelhető képet kapjunk, vizsgáljuk meg a  $t = \tau$  ( $\tau$  állandó) térszerű hipersíkkal való metszést. Egy  $(\tau, x, y, z)$  pontban mindegyik  $X$  fényszerű vonal metszi ezt a hipersíkot.  $X$  irányát itt ábrázolni is tudjuk, ha megvizsgáljuk ebben a pontban az  $X$ -hez húzott érintővektornak a hipersíkra eső vetületét. Az érintővektoroknak ezek a vetületei ekkor érintői egy a hipersíkban fekvő görbeseregnek s így számot kell hogy adjanak a Robinson-nyalábok szerkezetéről. Ha (4.5)-ben a  $t$ -t egyszerűen  $\tau$ -val és  $dt-t$   $ds = (dx^2 + dy^2 + dz^2)^{1/2}$ -nel helyettesítjük, megkapjuk az említett görbék differenciálegyenleteit. Ekkor azt kapjuk, hogy

$$(x+iy)(ds-dz) = (\tau-z+i\varepsilon)(dx+idy).$$

Ezen egyenletek megoldásai (eltekintve az  $x+iy = \text{állandó}$ , hamis megoldástól)



a következők:

$$\left. \begin{aligned} x^2 + y^2 + (z - \tau)^2 - 2\varepsilon(x \sin \varphi + y \cos \varphi) \operatorname{tg} \theta &= \varepsilon^2, \\ z - \tau &= (x \cos \varphi - y \sin \varphi) \operatorname{tg} \theta, \end{aligned} \right\} \quad (4.8)$$

ahol  $\theta$  és  $\varphi$  az egyes görbéket meghatározó állandók. Ezek a görbék nyilvánvalóan körök, mivel gömböknek síkokkal való metszeteik. Ezek úgy csavarodnak egymás köré, hogy két kör mindig össze van kapcsolva. Ha  $\varepsilon > 0$ , azaz ha  $R_x$  jobbsodrású<sup>21</sup>, akkor a csavarás pozitív forgási értelmű. A körök egy közös tengellyel bíró tóruszszerűen<sup>22</sup> fekszenek, amelyet úgy kapunk meg, hogy két egyenletből kiküszöböljük a  $\varphi$ -t. [Ezek a tóruszok az  $(x, z)$  síkban fekvő közös tengelyű körökből álló rendszer forgásai (forgásfelületei) a  $z$  tengely körül.]

A kiegészített  $M$  téridő szempontjából a  $t = \tau$  hipersíkról fel kell tennünk, hogy a végtelenben egy ponttal ( $I$ -vel konform módon) ki van elégítve. Topológiai szempontból ekkor egy  $S^3$  háromdimenziós gömb lesz belőle (a  $t = \tau$  hipersík úgy tekinthető, mint a gömb sztereografikus vetülete). Az  $S^3$ -on levő vektortér sehol sem szinguláris és sehol sem tűnik el. A körök például szolgálhatnak arra az esetre, ami az  $S^3$  Hopf-féle „rostozása” (fibring) néven ismert, (egy másik példa erre az  $S^3$ -on levő „Clifford-féle párhuzamos vonalak” esete).

Megjegyzendő, hogy a hipersíkban levő minden kör átmegy a  $\theta = 0$  speciális esetnek megfelelő,  $|\varepsilon|$  sugarú és  $z = \tau$ ,  $x = y = 0$  középpontú (legkisebb) körön. Ha  $\varepsilon$  kicsi, akkor ez a kör — növekedő  $\tau$  mellett — olyan utat ír le, amely megközelíti egy fényszerű vonal útját. Ha  $\varepsilon$  nulla, akkor az út pontosan megegyezik a  $z = t$ ,  $x = y = 0$  fényszerű vonal útjával. Ha  $\varepsilon$  kicsi, akkor a Robinson-nyaláb vonalai egy közelítő fényszerű vonal definíciójának vehetők, de a vonalak — bár csavarodnak egymás körül — teljesen soha sem találkoznak. A csavarodás lehet pozitív és negatív értelmű aszerint, hogy  $R_x$  jobb- vagy balsodrású. [Határesetben  $\varepsilon \rightarrow 0$ , a (4.8) körök mind érintik  $z = \tau$ -nál a  $z$  tengelyt. Az ezen körökhöz húzott érintők mind merőlegesek azokra a gömbökre, amelyek a  $z = \tau$  helyen érintik az  $(x, y)$  síkot, mivel ezek a gömbök a  $z = \tau$ -nak azon fénykúpokkal való metszetei, amelyek csúcsai a  $z = t$ ,  $x = y = 0$  helyen vannak. Tehát ebben az esetben — amint várható volt — a nyaláb vonalai éppen ezen fénykúpok alkotói.]

## V. A TWISTORHOZ TARTOZÓ SPINORTÉR

Fentebb már láttuk, hogy a Robinson-nyaláb vonalaihoz húzott érintő vektorok a fényszerű vektorok olyan terét alkotják, amely  $M$ -en mindenhol reguláris és sehol sem tűnik el. Az általános  $R$  Robinson-nyalábot spinorokkal olyan tömör alakban írhatjuk fel, amely (egyebeken kívül) ezeket a tulajdonságokat is igen egyszerűen tárja elénk. Majd ez a twistorok értelmezésére vezet bizonyos spinorterek segítségével.

Legyen  $R_x = \bar{L}_x$ , mert így használhatjuk a II. és III. fejezet jelöléseit. Annak feltétele, hogy  $X$  az  $L$  kongruenciához tartozzék, vagyis hogy  $X^\alpha \bar{L}_\alpha = 0$  legyen, ekkor (3.7) és (3.2) alapján

$$0 = \zeta^A \bar{\mu}_A + \eta_{A'} \bar{\lambda}^{A'} = \zeta^A (\bar{\mu}_A - i x_{AA'} \bar{\lambda}^{A'}),$$

<sup>21</sup> Az itt szereplő csavarodási irány természetesen attól függ, hogy a (2.4)-ben szereplő mátrixok közül „jobb- vagy balsodrású” mátrixokat választottunk-e.

<sup>22</sup> Hálával tartozom J. Terryl-nek és J. E. Reeve-nek a Hopf-féle „rostozásra” vonatkozó megfigyelésért.



amiből következik, hogy  $\xi_A$  arányos a zárójelben levő kifejezéssel. Mivel  $X^z$ -át az  $X$  csak egy arányossági tényezőtől eltekintve határozza meg, módunkban áll a  $\xi^A$ -ra vonatkozó skálafaktort úgy megválasztani, hogy

$$\xi_A = \bar{\mu}_A - i x_{AA'} \bar{\lambda}^{A'} \quad (5.1)$$

legyen. Ezt a (5.1)-et egy *spinortér* definíciójaként foghatjuk fel, mert  $\xi_A x_j$  függvénye, a hozzá tartozó  $v^j \leftrightarrow \xi^j \bar{\xi}^{j'}$  fényszerű vektorok pedig az  $\bar{L}$  nyaláb vonalaihoz húzott érintők. Mivel  $\lambda^A x_{AA'} \bar{\lambda}^{A'}$  valós,

$$\text{Re}(\bar{\lambda}^A \xi_A) = \text{Re}(\lambda^A \bar{\mu}_A) = \frac{1}{2} L^z \bar{L}_z, \quad (5.2)$$

így  $\xi_A$  csak akkor tűnik el, ha  $L^z$  zérus. Az (5.1)-gyel definiált fényszerű irányok tere, azaz az  $L$  Robinson-nyaláb így  $M\{I\}$ -ben mindenütt *jól definiált és reguláris*. Rövidesen látni fogjuk, hogy a végtelenben való regularitás is (5.1) konform transzformációs tulajdonságaiból következik.

Most legyen

$$\nabla_{BB'} \equiv \partial/\partial x^{BB'}, \quad (5.3)$$

és így  $\nabla_{BB'} x_{AA'} = \varepsilon_{AB} \varepsilon_{A'B'}$ . Ekkor (5.1)-ből

$$\nabla_{BB'} \xi_A = i \varepsilon_{BA} \bar{\lambda}_{B'}. \quad (5.4)$$

Ekkor a  $\xi_A$  tér kielégíti a

$$\nabla_{(B}^{B'} \xi_{A)} = 0 \quad (5.5)$$

differenciálegyenletet. Megfordítva is: ebből az egyenletből rekonstruálhatjuk az (5.1) kifejezést. Ugyanis (5.5)-ből következik, hogy egy  $i\bar{\lambda}_{B'}$  spinorra vonatkozólag a  $\nabla_{BB'} \xi_A$  derivált alakja megegyezik (5.4)-gyel. Ennek a  $\bar{\lambda}_{B'}$ -nek állandónak kell lenni, mivel  $\nabla_C^C \nabla_B^{B'} \xi_A = 0$  [ami (5.5)-ből következik, mert az  $A$  és  $B$ -ben és  $A$  a  $C$ -ben fennálló antiszimetriából következően a kifejezés nulla]. Ha (5.4)-et integráljuk, közvetlenül megkapjuk (5.1)-et, ahol  $\bar{\mu}_A$  egy másik állandót jelent.

Így arra a fontos eredményre jutottunk, hogy *kölcsönösen egyértelmű kapcsolat áll fenn a  $\begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}$  valenciájú twistorok és az (5.5)-öt kielégítő spinorterek között*. Ez pedig lehetővé teszi a twistoroknak egy, a Robinson-nyalábnál teljesebb előállítását, mivel itt az  $L^z$  arányossági tényezője is szerepel. Megjegyezzük, hogy  $\xi_A$ -val  $L^z \bar{L}_z$  is egyszerűen kifejezhető:

$$L^z \bar{L}_z = \text{Im}(\bar{\xi}^B \nabla_B^A \xi_A). \quad (5.6)$$

De bennünket nemcsak az  $M\{I\}$ -vel, hanem az *egész*  $M$ -mel kapcsolatosan is érdekelnek a twistorok, így azt is kérdezzük, hogy a  $\xi_A$  teret hogyan kell definiálnunk a végtelenben. Itt lényegében csak annak igazolását kell megkövetelnünk, hogy (5.5) konform transzformáció hatására invariáns legyen [inverziók esetében például lásd a (7.18)-at, mert ekkor  $I$  végesben levő pont<sup>7</sup> lesz]. Ezt az invarianciát úgy valósíthatjuk meg<sup>23</sup>, ha kikötjük, hogy  $\xi_A$ -nak úgy kell transzformálódnia, mint egy  $\frac{1}{2}$  súlyú konform sűrűségnek. Ekkor az (5.5) téregyenlet is kielégül a végtelenben, abban

<sup>23</sup> Lásd a 7. sz. lábjegyzetet, valamint az idevágó képleteket illetően a (10.1), (10.7) és (10.8) egyenleteket.



az értelemben, hogy az egy, az  $I$  fénykúpján reguláris metrikára vonatkozólag érvényes. Ez pedig szabatosan definiálja az  $\bar{L}$  Robinson-nyalábót a végtelenben. (Valójában az  $\bar{L}$ -nak csak egy — a  $\lambda^A$  iránynak megfelelő — olyan egyenese van, amely teljes egészében a végtelenben fekszik.) Az (5.6) mennyiség konform transzformáció hatására szintén invariáns<sup>23</sup>  $\left(\xi_A \frac{1}{2} \text{ súlyú}\right)$ , így  $L^\alpha \bar{L}_\alpha$ -t a  $\xi_A$  spinortér — vagy az  $L^\alpha$  twistor — konform invariánsának nevezhetjük.

Még hátra van egy apróság a  $\xi_A$  térnek a végtelenbe való kiterjesztését illetően. Ismeretes, hogy  $M\{I\}$ -ben lehet kétértékű (spinor) tereket definiálni. Most azonban arra van szükségünk, hogy egy spinorteret globálisan definiáljunk  $M$ -en. Ebben a tekintetben némi nehézséget okoz az a körülmény, hogy  $M$  többszörösen összefüggő. De ehelyett minden esetben  $\xi_A \xi_B$ -vel vagy a vele asszociált bivektorral [lásd (2.7)-et] dolgozhatunk, mert ezek nem kétértékűek. Ekkor azt várná az ember, hogy — előjeltől eltekintve — talál egy twistor-reprezentációt. Kiderül azonban [lásd (7.25)-öt], hogy azok a twistorok, amelyek teljes valenciája páratlan, a konform csoport hatásával szemben *négyértékűek*. Így egy (páratlan valenciájú) twistor konformisan invariáns reprezentációja nem tudja megkülönböztetni a twistort a twistor  $i$ -szereztől. (Ez analóg azzal a ténnyel, hogy a páratlan valenciájú spinorokat tenzorokkal nem tudjuk tökéletesen előállítani Lorentz-kovariáns módon, és így a spinorok különböznek a negatívjuktól.) Most, hogy a  $\xi_A$  teret kiterjesztjük a végtelenbe, azt tapasztaljuk, hogy  $I$  fénykúpjának két oldalán nem tudjuk a teret pontosan egymáshoz illeszteni, hanem az egyik oldalon levő  $\xi^A$ -hoz a másik oldalon levő  $i\xi^A$ -t (vagy  $-i\xi^A$ -t) kell csatlakoztatni. [Ez expliciten belátható a (7.18)-ban szereplő inverzió segítségével, amelyre a konform faktor  $\Omega = x^j x_j / 2a^2$ . Az  $I$  fénykúpja az origó ( $\Omega = 0$ ) fénykúpjából transzformálódott, az origón áthaladva  $\Omega$  előjelet vált. A transzformált  $\xi^A$  tér az  $\Omega^{-1/2}$  faktort veszi fel.] Ha az (5.1) spinortér az  $M$  egész kiterjedésére van definiálva, akkor *négy értékűnek* kell tekinteni; ha  $\xi_A$  az egyik érték, akkor  $i\xi_A$ ,  $-\xi_A$ ,  $-i\xi_A$  a másik három.

Ha a spinorokat (előjeltől eltekintve) geometriailag reprezentálni tudjuk, akkor ebből az következik, hogy bármely  $\begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}$  valenciájú twistor — 1,  $i$ ,  $-1$ , vagy  $-i$  egy többszörösétől eltekintve — geometriailag előállítható. Mint láttuk [lásd a (2.7)-et],  $\xi_A$  fázisa egy, a fénykúpot érintő félsík-elemet definiál;  $-\xi_A$  ugyanazt a félsík-elemet definiálja. Így minden pontban  $\bar{L}_\alpha$  fázisa egy teljes, nem-irányított fényszerű síkelemet határoz meg. Ha követjük az  $L$  Robinson-nyalábhöz tartozó  $X$  vonalat, észrevevesszük, hogy az említett síkelem  $X$  körül, a nyaláb szomszédos vonalaival ellentétes irányban és azoknál kétszer gyorsabban forog. A végtelenben levő csatlakozások mikéntje okozza a síkelemek halmozódását az  $X$  pontjaiban, amelyek valójában egy Moebius-szalagot képeznek, így világossá válik, hogy a síkelemek irányítottsága miért nem konzisztens  $X$  mentén.

Hogy lássuk, hogy ezek a síkok hogyan forognak  $X$  körül, vizsgáljuk meg  $(\xi^B \xi^{B'} \nabla_{BB'}) \xi = i \xi^{B'} \bar{\lambda}_{B'} \xi_A$ -t [lásd (5.4)-et].  $2i \xi^{B'} \bar{\lambda}_{B'}$  valós része méri a  $\xi_A$ -val reprezentált vektor terjedési sebességét, a képzetes rész méri a  $\xi_A$  fényszerű irány körüli félsík-elem forgási sebességét. Az (5.2)-ből

$$\text{Im}(2i \xi^{B'} \bar{\lambda}_{B'}) = -2 \text{Re}(\xi_B \lambda^B) = -L^\alpha \bar{L}_\alpha,$$

ahonnan látható, hogy a félsík-elem pozitív vagy negatív irányban forog aszerint,



hogy az  $L^z$  twistor jobb — vagy balsodrású. (Azt gondolhatnánk, hogy a forgási sebesség itt állandó, de ez tévedés, mert  $X$  különböző pontjaiban különböző a skálázás.) Megjegyzendő, hogy ha  $L^z$  nulla, akkor a félsík-elem nem forog. De Moebius-szalagot most is kapunk, mert a végtelenben tulajdonképpen mindig van egy félcsavarás.

Hogy lássuk, hogy a kongruencia szomszédos vonalai hogyan forognak  $X$  körül, vizsgáljuk meg

$$\xi^A \bar{\xi}^{B'} \nabla_{BB'} \bar{\xi} = -i \bar{\xi}^{B'} \bar{\lambda}_B \xi_B \quad (5.7)$$

egyenletet. Itt  $-i \bar{\xi}^{B'} \bar{\lambda}_B$  valós része a fényszerű vonalak kongruenciáját, képzetes része pedig egymás körüli<sup>24</sup> forgásukat méri. A forgás a félsíkok forgásával ellentétes értelmű és fele olyan gyors.

A fényszerű vonalak divergenciája és a  $\xi_A$  nagyságában bekövetkező változás nem konform kovariáns fogalmak, de a forgások igen. A fényszerű vonalak egy nyalábjára vonatkozó másik konform kovariáns fogalom ezen vonalak *nyírása*.<sup>11, 24</sup> Jelen esetben

$$\xi^B \xi^A \nabla_{BB'} \xi_A = 0, \quad (5.8)$$

ami azt mondja ki, hogy a nyírás *eltűnik*.

## VI. A KOMPLEX PROJEKTÍV $C$ TÉR

Már láttuk, hogy az  $M$ -ben levő nulla-vonalak  $\infty^5$  rendszert alkotnak, amelyet  $\infty^6$  rendszerré alakíthatunk a „komplexesített” fényszerű vonalak bevonásával (ez utóbbiak előállíthatók bizonyos — Robinson-nyaláboknak nevezett — rokon szerkezetekkel). Ezen  $\infty^6$  rendszer elemeihez rendelhetünk komplex projektív koordinátákat:  $(L^z) = (L^0, L^1, L^2, L^3)$ . Ez azt jelenti, hogy éppen az  $L^0:L^1:L^2:L^3$  három komplex viszony szignifikáns és  $L^0, \dots, L^3$ -ra vonatkozóan csak azt kötjük ki, hogy egyidejűleg nem lehetnek *mind* nullák. Ezt a  $\infty^6$  rendszert egy *három dimenziós komplex projektív térnek* tekinthetjük és a továbbiakban  $C$ -vel fogjuk jelölni.  $C$  pontjai éppen  $M$  (fény-vonalai és) „komplexesített” fényszerű vonalai.

Bármely adott esetben két kép közül választhatunk, nevezetesen az  $M$ -mel, vagy a  $C$ -vel adott kép közül. Például: az  $(L^z)$  projektív koordinátájú  $L$  objektumról feltehetjük, hogy az — mondjuk — az  $M$  valós téridő „komplexesített” fényszerű vonala ( $M$  kép), vagy pedig egyszerűen egy pont egy bizonyos projektív hármas térben ( $C$  kép). Ez csak két különböző *szemléltetése* ugyanannak a fizikai szituációnak. De ahhoz, hogy a két kép teljesen ekvivalens legyen, tudnunk kell, hogy mi felel meg egy  $M$ -ben levő fényszerű vonal *valóságának* az  $C$ -ben, az  $M$ -ben levő fényszerű vonalak *metszésének* és végül az  $M$ -ben levő *pontoknak*. Ez tulajdonképpen azt követeli meg, hogy az  $L^z \leftrightarrow \bar{L}_z$  konjugációs viszonynak a  $C$  képben értelme legyen.

Már láttuk, hogy az  $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$  valenciájú  $L^z$  twistor a  $C$  tér egy  $L$  pontjának felel meg, a  $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$  valenciájú  $R_z$  twistor ezért a  $C$  térben levő  $R$  sík duális fogalmának felel meg, nevezetesen mindazon  $X$  pontok alkotta síknak, amelyre fennáll, hogy  $X^z R_z = 0$ .

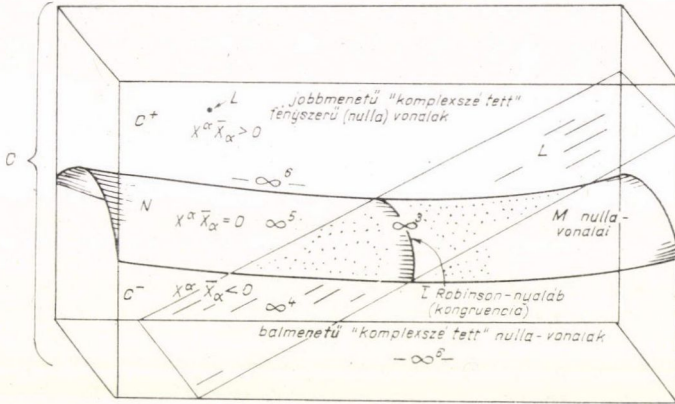
<sup>24</sup> P. Jordan, J. Ehlers és R. Sachs, Akad. Wiss. Lit. Mainz, no. 1 (Mainz 2) (1961); E. T. Newman és R. Penrose, J. Math. Phys. 3, 566 (1962).



(Ez természetesen komplex értelemben sík. Ha mint *valós* sokaságot nézzük, nem más, mint a  $C$  hat valós dimenziójú sokaság négy dimenziós alhalmaza.) Az  $L^\alpha \leftrightarrow \bar{L}_\alpha$  konjugációs viszony így egy pont  $\leftrightarrow$  sík megfelelést ír le  $C$ -ben, amelyet  $(+, +, -, -)$  előjelezésű *hermitikus korrelációnak* nevezhetünk. Az előjelezés itt az

$$X^\alpha \bar{X}_\alpha = X^0 \bar{X}^2 + X^1 \bar{X}^3 + X^2 \bar{X}^0 + X^3 \bar{X}^1, \quad (6.1)$$

hermitikus alakra utal. Ez a hermitikus korreláció  $C$  geometriai szerkezetének *lényeges* része.



4. ábra. A  $C$ -kép

Az  $M$ -ben levő (valós) fényyszerű vonalaknak  $C$ -ben az  $(S^3 \times S^2)$  topológiájú) öt valós dimenziós  $N$  alhalmaz pontjai felelnek meg, amelyet az  $X^\alpha \bar{X}_\alpha = 0$  egyenlet definiál. Így  $N$  hiperfelület, ha  $C$ -t valós hatdimenziós sokaságnak tekintjük — de nem hiperfelület,  $C$  komplex szerkezete értelmében.  $C^+$ -nak nevezzük  $C$  azon alhalmazát, melyre  $X^\alpha \bar{X}_\alpha > 0$  és  $C^-$ -nek  $C$  azon részét, amelyre  $X^\alpha \bar{X}_\alpha < 0$ . A  $C^+$  és a  $C^-$  alhalmazok elkülönülnek egymástól és közös határuk  $N$  (4. ábra). Ha  $L$  a  $C$  tetszőleges pontja, akkor az  $\bar{L}$  síkot az  $LN$ -re vonatkozó polár-síkjának tekinthetjük, mivel  $X^\alpha \bar{X}_\alpha$ -t  $L_\alpha$ -val „polarizálva”  $X^\alpha \bar{L}_\alpha = 0$ -t (vagy  $L^\alpha \bar{X}_\alpha = 0$ -t) kapunk, ami az  $\bar{L}$  sík egyenlete. Az  $L$ -l asszociált Robinson-nyaláb most az  $\bar{L}$  síknak  $N$ -nel való  $(S^3)$  topológiájú metszete. (Itt egy kis jelölési következetlenség keletkezett, mert az előzőekben az  $\bar{L} \cap N$  Robinson-nyalábot jelöltük  $\bar{L}$ -sal és nem az egész síkot. A Robinson-nyalábok — definíció szerint — csak  $M$  „valós” fényyszerű vonalait foglalják magukban. Ha zavarra adhat okot, akkor a jelen esetben „ $\bar{L}$  Robinson-kongruenciát”-t vagy „ $\bar{L}$  síkot” fogunk mondani, de általában  $\bar{L}$  egy — a  $C$ -ben levő — egész síkra vonatkozik.) Ha  $L$   $N$ -nen fekszik, akkor az  $\bar{L}$  sík az  $N$  komplex érintő síkjának tekinthető  $L$ -nél.

Ha most ábrázolni akarjuk  $M$  egy pontját a  $C$  kép segítségével, akkor úgy járhatunk el, hogy felhasználjuk  $M$  fényyszerű vonalainak metszési tulajdonságait.  $M$  bármelyik pontja egyértelműen ábrázolható az  $M$ -ben levő fényyszerű vonalaknak egy  $\infty^2$  rendszerével, nevezetesen a  $P$ -hez tartozó fénykúp alkotóival.  $K$  és  $L$  legyen két,  $P$ -n áthaladó fényyszerű vonala  $M$ -nek. Ekkor a  $P$ -hez tartozó fénykúp alkotói



$\bar{K}$ -nak és  $L$ -nak közös fényyszerű vonalai, (ami azt jelenti hogy az alkotóknak mind  $K$ -t, mind  $L$ -et metszeniök kell). A  $C$  képből ennek egy  $N$ -en levő  $\infty^2$  vonal-rendszer<sup>25</sup> felel meg és  $N$  a  $\bar{K}$  és a  $\bar{L}$  sík metszésén fekszik. Ez a metszés pedig egyszerűen komplex projektív (egyenes) vonal  $C$ -ben. Azt az eredményt kaptuk tehát, hogy  $M$  bármely pontját a  $C$  képből egy olyan komplex projektív vonal ábrázolja, amely teljes egészében  $N$ -en fekszik. (Egy komplex projektív vonal topológiailag — a valós szerkezete szemszögéből — egy  $S^2$  gömb. Ez megegyezik a  $P$ -n átmenő fényyszerű vonalak halmazának, vagyis a  $P$ -hez tartozó fényyszerű irányok halmazának topológiájával.) A jelölésben itt nem teszünk különbséget az  $M$ -ben levő  $P$  pontok és az  $M$ -ben levő  $P$  ponton áthaladó fényyszerű vonalak rendszere között. Így módunkban áll a  $C$  képből is  $P$ -vel jelölni azt a *vonalat*, amely az  $M$  képből ezt a  $P$  *pontot* jelenti.

És megfordítva: a  $C$  kép bármelyik, teljes egészében  $N$ -en fekvő  $P$  vonalának az  $M$  képből egy  $P$  pont felel meg. (A projektív geometria kifejezésével élve a  $C$  képből a „vonalt” mindig „komplex projektív egyenes vonal”-at jelent.) Hogy ezt belássuk, vizsgáljuk meg a  $C$  képet és a  $P$  vonal teljes egészében fekszik  $N$ -en.  $K$  és  $L$  legyen két pont  $P$ -n. Ekkor  $K^\alpha \bar{K}_\alpha = 0$ ,  $L^\alpha \bar{L}_\alpha = 0$  és még általánosabban  $(K^\alpha + \beta L^\alpha)(\bar{K}_\alpha + \beta \bar{L}_\alpha) = 0$  minden komplex  $\beta$ -ra, (mivel egy  $P$  vonalon fekvő általános ponthoz egy  $K^\alpha + \beta L^\alpha$  alakú twistor tartozik). Innen  $L^\alpha \bar{K}_\alpha = 0$ . Így az  $M$  képből az  $L$  és  $K$  egyeneseknek metszeniök kell egymást. Ez érvényes *bármely* két, a  $P$  által reprezentált  $\infty^2$  rendszerhez tartozó fényyszerű vonalra. Ennél fogva mindeme fényyszerű vonalaknak egy *pontban* kell metszeniök egymást, vagyis e ponthoz tartozó fénykúp alkotóinak kell lenniük. Ezért ezt a pontot  $P$ -vel jelöljük és a helyzet ugyanaz, mint előbb.

Jegyezzük meg, hogy a  $C$  képből annak feltétele, hogy egy  $L$  pont rajta van egy  $P$  egyenesen —, ha mind  $L$ , mind  $P$  az  $N$ -en fekszik — az  $M$  képből annak feltételeként jut kifejezésre, hogy az  $L$  fényyszerű vonal átmegy a  $P$  ponton.  $M$  és  $N$  között tulajdonképpen egyfajta duális megfeleltetés áll fenn. Összefoglalva: az  $M$  kép és a  $C$  kép  $N$  alhalmaza között a következő kapcsolat van:

*Kölcsönös és egyértelmű viszony van az  $M$ -ben levő fényyszerű vonalak és az  $N$ -ben levő pontok között.* (6.2)

*Kölcsönös és egyértelmű viszony van az  $M$ -ben levő pontok és az  $N$ -ben levő komplex vonalak között.* (6.3)

*Annak a feltételnek, hogy egy pont rajta fekszik egy  $M$ -ben levő fényyszerű vonalon, az a feltétel felel meg  $N$ -ben, hogy a megfelelő egyenesnek át kell haladnia a megfelelő ponton.* (6.4)

A (6.4)-ből láthatjuk, hogy annak feltétele  $M$ -ben, hogy két pont közötti vektor fényyszerű legyen, egyszerűen az, hogy a megfelelő fényyszerű vonalaik  $N$ -ben messék egymást; az a feltétel pedig, hogy két nulla-vonal  $M$ -ben messe egymást, megfelel annak, hogy az  $M$ -ben levő két megfelelő pontot összekötő vonal teljes egészében  $N$ -ben fekszik.

Kérdezhetjük, hogyan interpretálhatók  $C$  azon vonalai, melyek *nem* fekszenek teljes egészükben  $N$ -en. Projektív hármastérben fekvő vonalak négy dimenziós rendszert alkotnak úgy, hogy ezek a vonalak  $M$ -ben — valós dimenziókkal kifejezve —

<sup>25</sup> A  $\infty^r$  szimbólum *valós* értelemben vett  $r$ -dimenziósságot jelöl.



egy  $\infty^8$  objektum-rendszert írnak le. Ez azt a gondolatot kelti, hogy  $C$ -ben egy általános vonal egy  $M$ -beli „komplexesített” pontot reprezentál; a dimenziók egyszerű megkettőződése  $M$ -ben pedig azt sugallja, hogy ezek a szokott értelemben komplexesített pontok s így helyvektoraiknak lehet képzetes részük. Hogy belássuk ennek az interpretációnak következetes voltát, vizsgáljunk meg a  $C$  képben egy általános egyenest, amely  $C$  két általános pontját,  $L$ -et és  $X$ -et köti össze. A II. és III. fejezet jelöléseit alkalmazva, felírhatjuk a (3.10) kifejezést. Ezt a  $p_j$  komplex vektort úgy tekinthetjük, mint az  $L$ -el és  $X$ -el definiált két  $M$ -beli („komplexesített” vagy nem) fényszerű vonal komplex metszéspontjának helyvektorát, vagy  $M$ -beli képét. (Megjegyzendő, hogy ebben az értelemben bármely két különböző fényszerű vonalnak  $M$ -ben egy közös komplex pontja van.)

$C$  tetszőleges vonala hat osztály egyikébe sorolható. Ha egy  $M$ -ben levő  $P$  komplex pontnak megfelelő  $p^j$  helyvektor képzetes része  $q^j$ , akkor [(3.10)-ből]:

$$P \subset C^+ \Leftrightarrow q^j \text{ időszerű, jövőbe mutató;} \quad (6.5)$$

$$P \subset C^+ \cup N, \quad P \not\subset N, \quad P \not\subset C^+ \Leftrightarrow q^j \text{ fényszerű, jövőbe mutató;} \quad (6.6)$$

$$P \text{ egyaránt metszi } C^--\text{-t, } N\text{-t, } C^+ \Leftrightarrow q^j\text{-t, térszerű, nem zérus;} \quad (6.7)$$

$$P \subset C^- \cup N, \quad P \not\subset N, \quad P \not\subset C^- \Leftrightarrow q^j \text{ fényszerű, múltba mutató;} \quad (6.8)$$

$$P \subset C^- \Leftrightarrow q^j \text{ időszerű, múltba mutató;} \quad (6.9)$$

$$P \subset N \Leftrightarrow q^j = 0. \quad (6.10)$$

A (6.6) és (6.8) esetben a  $C$ -beli  $P$  vonal érinti  $M$ -et. A (6.5) halmazt (az  $M$  képben) néha a „jövőcsőnek”<sup>10</sup> nevezik.

A geometerek jól ismerik a vonalak ún. Klein- vagy Grassmann-féle<sup>26</sup> reprezentációját a projektív háromdimenziós térben. Ez négy- (komplex) dimenziós kvadratikus felület, melynek pontjai megfelelnek a komplex projektív hármastér vonalainak. Így esetünkben az  $N$  teljesen komplexesített  $M^*$  változata a  $C$ -ben levő vonalak Klein-féle reprezentációjának tekinthető. A III. fejezetben már említettük, hogy  $M$  maga lényegében valós  $(++----)$  kvadratikus négyes sokaság.  $M^*$  ennek a kvadratikus felületnek komplex változata. Az  $M^*$ -on két síkrendszer van, amelyeket  $\alpha$ , illetve  $\beta$  síkoknak nevezünk. Az  $\alpha$  síkok a  $C$ -ben levő pontoknak, a  $\beta$  síkok a  $C$ -ben levő síkoknak felelnek meg.  $M$ -et  $M^*$  alhalmazának tekinthetjük. Az  $M$ -et metsző  $\alpha$  síkok  $M$ -et  $M$  fényszerű vonalaiban metszik. A  $\beta$  síkok esetében ugyanez a helyzet. Az  $M$ -ben levő fényszerű vonalak — ha a komplexszé tevés megfelelően történt — valójában komplex projektív síkpárokká válnak, mégpedig — minden teljesen „komplexesített” fényszerű vonal esetében — egy  $\alpha$  és egy  $\beta$  síkká. A fényszerű vonalaknak twistorok segítségével történő itt követett komplexesítése azt jelenti, hogy a fényszerű vonalak reprezentálására csak  $\alpha$  síkokat használunk.

Az eddigi tárgyalás nagy részét el tudtuk volna végezni az  $M^*$  sokaság segítségével is. De mind ez ideig lényegesnek tartottuk, hogy amennyire csak lehet, megpróbáljuk az  $M$  téridőben levő „valós” szerkezetek segítségével reprezentálni a twistorokat.

<sup>26</sup> Lásd bármelyik klasszikus algebrai (analitikus) geometriával foglalkozó standard munkát, pl. J. A. Todd, *Projective and analytical Geometry* (I. Pitman, London, 1947); J. G. Semple és L. Roth, *Algebraic Geometry* (Clarendon Press, Oxford, England, 1949).

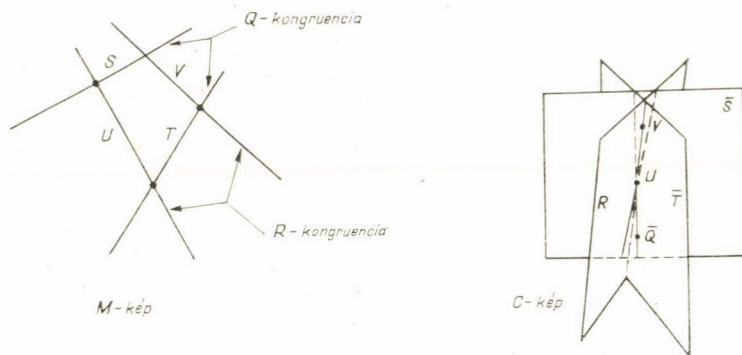


Hátra van még azonban egy utolsó feltétel felírása abból a célból, hogy  $C$  geometriáját  $M$  segítségével teljesen elő tudjuk állítani. Ez azt jelenti, hogy meg kell tudnunk magyarázni  $M$ -beli geometriai feltételekkel<sup>27</sup> egy twistor skalárszorzat eltűnését.

Vizsgáljuk meg a

$$\bar{Q}^a R_a = 0 \quad (6.11)$$

feltételt. Ha mind  $\bar{Q}$ , mind  $\bar{R}$   $M$ -ben levő fényszerű vonalak, akkor ez — mint már láttuk — a vonalak metszésének feltétele. Ha  $\bar{Q}$  fényszerű vonal és  $R$  Robinson-nyaláb, akkor (6.11) egyszerűen annak feltétele, hogy  $\bar{Q}$  az  $R$  nyalábhoz tartozzék. Hátra van még annak az esetnek vizsgálata, amikor  $Q$  is és  $R$  is Robinson-nyaláb  $M$ -ben.  $S$  és  $T$  legyen két, a  $Q$  nyalábhoz tartozó fényszerű vonal,  $U$  és  $V$  pedig az  $R$  kongruenciához tartozó fényszerű vonalak. Tegyük fel, hogy a három  $(S, U)$ ,  $(U, T)$ ,  $(T, V)$  vonalpár metszi egymást. Ekkor (6.11) érvényességének szükséges és elégséges feltétele, hogy a  $(V, S)$  pár is messe egymást (5. ábra). Hogy ezt megértsük, vizsgáljuk meg a  $C$  képben a  $V, U, Q$  pontokat és az  $S, T, R$  síkokat. Most  $S \in Q$  és  $T \in Q$ , ahonnan  $\bar{Q} \in \bar{S}$ ,  $\bar{Q} \in \bar{T}$ . Hasonlóképpen  $U \in R$ ,  $V \in R$  és  $U \in \bar{S}$ ,  $U \in \bar{T}$ . Így az  $UV$  egyenesnek az  $R$  és  $\bar{T}$  síkok metszetének kell lennie (5. ábra). Ha (6.11) fennáll, akkor  $Q$ -nak is ezen a vonalon kell feküdnie és ebből  $V \in \bar{S}$ . Megfordítva: ha  $V \in \bar{S}$ , akkor  $\bar{Q} \in R$ . Így az  $M$ -képben (6.11) érvényességének az a feltétele, hogy a  $V$  és  $S$  fényszerű vonalak messék egymást.



5. ábra.  $\bar{Q}_a R_a = 0$  feltétele az  $M$  képben az, hogy  $V$  és  $S$  messe egymást, a  $C$  képben pedig az, hogy  $V \in \bar{S}$ ; innen  $\bar{Q} \in R$ .

Ezzel igazolást nyert az  $M$  kép és  $C$  kép közötti geometriai ekvivalencia és ennek alapján a Minkowski-tér konform geometriája twistorokkal tökéletesen előállítható. A Minkowski-tér metrikus geometriája azonban megköveteli egy fix metrikus twistor bevezetését. Ezt majd a X. fejezetben végezzük el.

<sup>27</sup> Szigorúan véve azt is meg kellene mutatnunk, hogy a Robinson-nyaláb fogalma  $M$ -ben „geometriai”. A IX. fejezetben expliciten megadjuk ennek felépítését a fényszerű vonalak incidenciája segítségével, de a Robinson-nyaláb geometriai (és konformisan invariáns) jellege impliciten már mindenesetre a IV. és V. fejezetben megtalálható.



## VII. TWISTORTRANSZFORMÁCIÓK

Bár a twistorok transzformációs tulajdonságait expliciten még nem adtuk meg, az eddigi tárgyalásból következnek.  $M$ -nek bármilyen önmagára való folytonos transzformációja, ami megtartja konform struktúráját (és így  $M$  fénykúpját és fényszerű vonal szerkezetét) (6.4) alapján meg kell hogy feleljen  $N$  olyan önmagára való folytonos transzformációjának, amely megtartja ez utóbbi vonalszerkezetét. Továbbá, mivel a Robinson-nyaláb fogalma konformisan invariáns (lásd az V. fejezetet),  $N$ -nek ez a transzformációja egyértelműen kiterjed az egész  $C$ -tér egy transzformációjára. Már láttuk, hogy a  $C$ -ben levő pontok és síkok közötti (6.11) orthogonalitási reláció felírható az  $M$ -ben levő konform módon invariáns metszési tulajdonságok segítségével. Így a  $C$ -beli pontok kollineációjának  $M$ -ben konform-invariáns interpretációja van. Ebből következik, hogy a  $C$  képben  $M$  konform transzformációit  $C$  olyan folytonos pont-transzformációival állíthatjuk elő, amelyek megőrzik annak vonalszerkezetét és amelyekre vonatkozólag az  $M$  alsokaság invariáns.

Ha  $M$  olyan konform transzformációira szorítkozunk, amelyek folytonosak az azonossággal, akkor  $C$  megfelelő transzformációi is folytonosak az azonossággal. Az olyan transzformációk, amelyek megtartják  $C$  vonalszerkezetét (komplex értelemben véve)  $C$  projektív ponttranszformációi<sup>26</sup> kell hogy legyenek. Ha azonban figyelembe vesszük  $M$  azon transzformációit is, amelyekben tér- vagy időtükrözések is szerepelnek, akkor  $C$  anti-projektív transzformációit is meg kell vizsgálnunk, vagyis azokat a transzformációkat, amelyekben kombinálódik a komplex konjugáció művelete a projektív transzformációval (így a kereszttarányok konjugált komplexszé válnak).  $C$  azon transzformációját is vizsgálhatjuk, amelyek nem ponttranszformációk, hanem korrelációk<sup>28</sup> (duális megfelelés) és amelyek folyamán  $C$  pontjainak képei síkok, a síkok képei pedig pontok lesznek. Szigorúan véve ezek —  $C$  itteni felépítése miatt — nem fognak megfelelni  $M$  transzformációinak, de elégséges őket úgy tekinteni, mint amelyek  $M$  komplexesített  $M^*$  változatának transzformációit reprezentálják. Egy, az  $M$ -en definiált transzformációnak  $M^*$ -ra történő természetes (analitikus) kiterjesztéséről néha kiderül, hogy egy  $C$ -beli korrelációnak felel meg.

Az  $M^*$ -ban levő komplex konjugációt jelentő  $\mathcal{C}$  alapl műveletnek, ami az  $M$  valós teret változatlanul hagyja, a  $C$  képben egyszerűen az  $X^{\alpha} \leftrightarrow \bar{X}_{\alpha}$ -val adott hermitikus korreláció felel meg. Az  $M$  egy tértükrözéssel ekvivalens transzformációjának a  $C$  képben  $C$ -nek oly ponttranszformációja felel meg, amely antiprojektív és  $C^-$ -t felcseréli  $C^+$ -szal. (A Robinson-nyalábok csavarodási iránya a tértükrözés hatására ellenkezőre változik.) Ha azonban ezt ki akarjuk terjeszteni az egész  $M$  egy  $\mathcal{P}$  tértükrözésére, akkor — mivel analitikus — meg kell szüntetnünk  $C$  transzformációjának antiprojektív jellegét és ehelyett egy olyan korrelációt kell felvennünk, amely  $C^+[C^-]$   $X$  pontjait olyan  $\bar{Y}$  síkokba viszi át amelyekre vonatkozólag az  $Y$   $C^-[C^+]$ -ban van. A most vizsgált antiprojektív ponttranszformáció, amely  $C^+$ -t felcseréli  $C^-$ -szal, ekkor  $\mathcal{CP}$ -nek felelne meg. Hasonlóképpen,  $C$ -nek egy olyan ponttranszformációja, amely  $M$ -nek egy időtükrözését reprezentálja, antiprojektív, és itt mind  $C^-$ , mind  $C^+$  önmagába megy át. Ezért ez valójában  $\mathcal{CI}$ -t reprezentálja, ahol  $\mathcal{I}$  leírja  $M$  ezen időtükrözésének  $M^*$ -ra való (analitikus) kiterjesztését. A  $C$ -nek  $\mathcal{I}$ -t reprezentáló transzformációja olyan korreláció, amely  $C^+[C^-]$  minden egyes  $X$  pontját egy  $\bar{Y}$  síkba viszi át, amelyre  $Y \in C^+[C^-]$ . A  $\mathcal{PI}$  transzformáció, amely két projektív korreláció szorzata,  $C$ -nek egy projektív ponttranszformációja. Ez felcseréli  $C^-$ -t  $C^+$ -szal és nem folytonos az azonossággal (összefüggő az egybevágó-



sággal), kivéve, ha a *komplex* konform transzformációkkal kibővítjük  $M^*$  transzformáció csoportját. (Ezek nem pont-transzformációi  $M$ -nek, de úgy tekinthetjük őket, mint az  $M$ -ben levő vonalrendszerre ható transzformációkat, amelyek a Robinson-nyalábokat egymásba viszik át. A  $C$  képben  $C$  azon projektív transzformációival reprezentáljuk ezeket, amelyekre  $N$  nem invariáns.) A  $\mathcal{PCI}$  transzformáció  $C$ -ben antiprojektív korreláció.

Vizsgáljuk meg részletesebben egy megengedett transzformáció hatását egy  $\begin{bmatrix} r \\ s \end{bmatrix}$  valenciájú  $A_{\rho, \dots, \tau}^{\alpha, \beta, \dots, \delta}$  általános twistorra. (Az  $\alpha, \beta, \dots, \delta$  indexekből  $r$  darab, a  $\rho, \dots, \tau$  indexekből  $s$  darab van és mindegyik a 0, 1, 2, 3 értékeket veheti fel. Egy általános twistor előállíthatunk az  $\begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}$  és  $\begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}$  valenciájú twistorok segítségével, bármelyik használatos módszerrel, amellyel „tenzorok” felépíthetők „vektorok”-ból, mint például a külső szorzatok lineáris kombinációi vagy egy indexű twistorok multilineáris leképezése skálárba. Vagy pedig az  $\begin{bmatrix} r \\ s \end{bmatrix}$  valenciájú  $A_{\rho, \dots, \tau}^{\alpha, \beta, \dots, \delta}$  twistor definiálására használhatjuk egyszerűen a transzformációs tulajdonságokat (itt pillanatnyilag csak azokat a transzformációkat vesszük figyelembe, amelyek folytonosak az azonossággal):

$$\bar{A}_{\rho, \dots, \tau}^{\alpha, \beta, \dots, \delta} = A_{\varphi, \dots, \psi}^{\chi, \lambda, \dots, \nu} t_{\chi}^{\alpha} t_{\lambda}^{\beta} \dots t_{\nu}^{\delta} T_{\varphi}^{\rho} \dots T_{\psi}^{\tau}. \quad (7.1)$$

A  $(t_{\beta}^{\alpha})$  és  $(T_{\beta}^{\alpha})$  mátrixok egymás inverzei:<sup>28</sup>

$$t_{\beta}^{\alpha} T_{\gamma}^{\beta} = \delta_{\gamma}^{\alpha} = T_{\beta}^{\alpha} t_{\gamma}^{\beta}. \quad (7.2)$$

Az  $X^{\alpha}, Y_{\alpha}$  twistorok, amelyek valenciája rendre  $\begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}$ ,  $M$  egy olyan konform transzformációjának hatására, amely folytonos az azonossággal, (ami azt jelenti, hogy  $C$  olyan transzformációja, amelyre  $C^+$  invariáns) a következőképpen transzformálódnak:

$$\bar{X}^{\alpha} = t_{\beta}^{\alpha} X^{\beta}, \quad \bar{Y}_{\alpha} = T_{\alpha}^{\beta} Y_{\beta}. \quad (7.3)$$

De mivel az  $\bar{X}_{\alpha}$  egy  $\begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}$  valenciájú twistor, következik, hogy

$$T_{\beta}^{\alpha} = \bar{t}_{\beta}^{\alpha}, \quad \text{azaz} \quad t_{\beta}^{\alpha} \bar{t}_{\gamma}^{\beta} = \delta_{\gamma}^{\alpha}, \quad (7.4)$$

ahol a komplex konjugáció esetében a twistorindexekre korábban már alkalmazott konvenciót használtuk (lásd 3.5-öt), nevezetesen azt, hogy komplex konjugáció esetén a felső és az alsó indexpozíciók felcserélődnek és a 0—1, és 2—3 párok is felcserélődnek, azaz<sup>17</sup>

$$\bar{t}_0^0 = \bar{t}_2^2, \bar{t}_1^0 = \bar{t}_2^1, \bar{t}_2^0 = \bar{t}_2^0, \bar{t}_3^0 = \bar{t}_2^0, \bar{t}_3^1 = \bar{t}_2^1, \bar{t}_0^1 = \bar{t}_3^2, \dots, \bar{t}_2^3 = \bar{t}_1^0, \bar{t}_3^3 = \bar{t}_1^1.$$

A (7.4) feltétel azt mondja ki, hogy a  $(t_{\beta}^{\alpha})$  mátrix pszeudouniter abban az értelemben,

<sup>28</sup>  $C$  transzformációi tulajdonképpen ugyanezek volnának, ha csak annyit kötnénk ki, hogy  $(T_{\beta}^{\alpha})$  legyen arányos  $(t_{\beta}^{\alpha})$  inverzével, ugyanis az  $X^{\alpha}$ -k projektív koordináták  $C$  számára. Itt mégis a szigorúbb (7.2) követelményt választjuk, mert a twistor arányossági tényezőjére szükségünk van, ha az V. fejezetnek megfelelő teljesebb reprezentációt használjuk.



hogy a (6.1) kifejezés invariáns, vagyis mátrixjelölést használva

$$(\bar{t}_{\beta}^{\alpha})^* \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} (t_{\delta}^{\gamma}) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (7.5)$$

ahol a csillag a szokott értelemben a hermitikus konjugáltat jelöli<sup>29</sup>.

A (7.4) egyenlet garantálja, hogy a komplex konjugáció művelete a fentebb közölt szabályok szerinti twistorművelet. Tehát, ha  $A_{\alpha\beta\gamma\delta}^{\alpha\beta\gamma\delta}$  egy  $\begin{bmatrix} r \\ s \end{bmatrix}$  valenciájú twistor, akkor  $\bar{A}_{\alpha\beta\gamma\delta}^{\alpha\beta\gamma\delta}$  egy  $\begin{bmatrix} s \\ r \end{bmatrix}$  valenciájú twistor (ahol<sup>17</sup> például  $\bar{A}_{21\dots 3}^{3\dots 0} = \bar{A}_{1\dots 2}^{03\dots 1}$  stb.). Természetesen az összeadás, a külső szorzás, a (felső és alsó indexek közötti) kontrakció és a felső és alsó indexeket nem keverő indexpermutáció szintén twistor-műveletek. Ez azt jelenti, hogy kommutálnak (7.1)-gyel. Megvizsgálhatnánk olyan (7.1) komplex-szesített twistortranszformációkat is, amelyekre (7.4) nem áll fenn. Ezek  $M^*$  olyan komplex konform transzformációinak felelnek meg, amelyekre  $M$  nem invariáns és az  $A_{\alpha\beta\gamma\delta}^{\alpha\beta\gamma\delta}$  és  $\bar{A}_{\alpha\beta\gamma\delta}^{\alpha\beta\gamma\delta}$  közötti reláció sem volna az. Ezeket a transzformációkat itt nem tárgyaljuk.

A  $(t_{\beta}^{\alpha})$  mátrixra még egy kikötést kell tennünk, mégpedig azt, hogy *modulusa* egy legyen, vagyis:

$$|t_{\beta}^{\alpha}| = 1. \quad (7.6)$$

Ez azt jelenti, hogy  $\varepsilon_{\alpha\beta\gamma\delta} \varepsilon^{\alpha\beta\gamma\delta}$  Levi Civita-féle szimbólumoktól [amelyeknek komponensei: +1, -1, 0, aszerint, hogy az  $(\alpha, \beta, \gamma, \delta)$  a (0, 1, 2, 3)-nak páros permutációja, páratlan permutációja vagy nem permutációja] megköveteljük, hogy *twistorok*, nem pedig csak „twistor-sűrűségek” legyenek. Ha ragaszkodnunk kell a twistoroknak ahhoz a pontos interpretációjához, amelyet az V. fejezetben vázoltunk, akkor ez *szükséges* feltétel. A (7.6) kissé bővíti a twistoralgebrát, amennyiben az a művelet, amellyel antiszimmetrikus twistorokból *duálisok* képezhetők, így megengedett. Megjegyzendő továbbá, hogy

$$\varepsilon_{\alpha\beta\gamma\delta} = \bar{\varepsilon}_{\alpha\beta\gamma\delta}, \quad \varepsilon^{\alpha\beta\gamma\delta} = \bar{\varepsilon}^{\alpha\beta\gamma\delta}, \quad (7.7)$$

mert a (2, 3, 0, 1) páros permutációja (0, 1, 2, 3)-nak.

A (7.1) kifejezések nem az egyedül megengedhető twistortranszformációk, mivel — mint már láttuk — a  $\mathcal{C}$ ,  $\mathcal{P}$ ,  $\mathcal{I}$ ,  $\mathcal{CP}$ ,  $\mathcal{CI}$  és  $\mathcal{PCP}$  műveletek ugyan  $M$  konform transzformációit szolgáltatják, de megfelelői  $C$  projektív pont-transzformációi-

<sup>29</sup> Egy twistor előállítás a komponensekkel talán úgy a legmegfelelőbb, ahogyan ebben a cikkben található, de semmi esetre sem az egyetlen lehetséges mód. Eljárásunk abban áll, hogy kikötjük: az  $E_{(0)}^{\alpha}$ ,  $E_{(1)}^{\alpha}$ ,  $E_{(2)}^{\alpha}$ ,  $E_{(3)}^{\alpha}$  koordináta bázis-twistorok nullák és kielégítik az  $E_{(0)}^{\alpha} \bar{E}_{(2)\alpha} = 1 = E_{(1)}^{\alpha} \bar{E}_{(3)\alpha}$  egyenleteket, és az összes többi skalárszorzat eltűnik. Egy másik lehetséges választás az volna, hogy megköveteljük:  $E_{(a)}^{\alpha} \bar{E}_{(b)\alpha} = (-1)^b \delta_{ab}$  ( $b$  szerint nem összegezzünk!), amikor is a twistorokra vonatkozó komplex konjugáció művelet (3.5) helyett  $L_0 = \bar{L}_0$ ,  $L_1 = -\bar{L}_1$ ,  $L_2 = \bar{L}_2$ ,  $L_3 = -\bar{L}_3$  alakú volna és a (7.5)-ben szereplő fix mátrix diag (1, -1, 1, -1)-re változnék. (A (2.13) spinorokkal való egyszerű kapcsolat azonban elveszíténénk.) A twistorok reprezentációjára vonatkozó egyetlen *lényeges* kikötés az, hogy az  $X^{\alpha} \bar{X}_{\alpha}$  kifejezés előjelezése (+ + - -) legyen [lásd (6.1)-et].



nak. Másrészt azonban  $\mathcal{P}\mathcal{I}$  igenis (7.1) alakú és (7.2), valamint (7.6) is fennáll, de (7.4)-et

$$T_{\beta}^{\alpha} = -\bar{t}_{\beta j}^{\alpha}; \quad t_{\beta}^{\alpha} \bar{t}_{\gamma}^{\beta} = -\delta_{\gamma}^{\alpha} \quad (7.8)$$

helyettesíti. Így  $\mathcal{P}\mathcal{I}$ -re azt kaptuk, hogy  $\tilde{A}^{\alpha\cdots} = -\bar{A}^{\alpha\cdots}$ , ha  $A^{\alpha\cdots}$  teljes valenciája páratlan. (Itt ismét feltettük, hogy (7.2) teljesül. Ha  $t_{\beta}^{\alpha} T_{\gamma}^{\beta} = -\delta_{\gamma}^{\alpha}$ -t választottuk volna, akkor  $\tilde{A}^{\alpha\cdots} = \bar{A}^{\alpha\cdots}$ , de  $\tilde{L}^{\alpha} \tilde{R}_{\alpha} = -L^{\alpha} R_{\alpha}$  stb.) A  $\mathcal{C}$  műveletet

$$A_{\alpha\cdots\tau}^{\alpha\beta\cdots\delta} \rightarrow \bar{A}_{\alpha\beta\cdots\tau}^{\alpha\cdots\delta} \quad (7.9)$$

adja, míg  $\mathcal{P}\mathcal{C}\mathcal{I}$  egy (7.1) alakú transzformációnak (7.9)-cel való kombinálása, ami kielégíti (7.8)-at is. A  $\mathcal{P}$  és  $\mathcal{I}$  műveletek a twistor-transzformációk

$$\tilde{A}_{\alpha\beta\cdots\delta}^{\alpha\cdots\gamma} = (\mp 1)^s A_{\alpha\cdots\psi}^{\alpha\lambda\cdots\gamma} u_{\alpha\lambda} u_{\beta\lambda} \cdots u_{\delta\lambda} \bar{u}^{\alpha\varphi} \cdots \bar{u}^{\gamma\psi} \quad (7.10)$$

által adott osztályhoz tartoznak, ahol  $(u_{\alpha\beta})$  és  $\mp(\bar{u}^{\alpha\beta})$  transzponáltja egység-modulusú inverz mátrixok:

$$u_{\beta\alpha} \bar{u}^{\beta\gamma} = \mp \delta_{\alpha}^{\gamma}; \quad |u_{\alpha\beta}| = 1. \quad (7.11)$$

A mínusz jel akkor érvényes, ha térirány-megfordítás történik, a plusz jel pedig akkor, ha az időirányítás fordul ellenkezőjére. A (7.11)-ből következik, hogy az  $(u_{\alpha\beta})$  mátrix is pszeudouniter (7.4) és (7.5) vagy (7.8) alapján. Ezek a transzformációk szolgáltatják  $C$  projektív korrelációit.  $C$ -nek  $\mathcal{C}\mathcal{P}$  és  $\mathcal{C}\mathcal{I}$  anti-projektív pont-transzformációit (7.10) és (7.9) kombinálásával kapjuk.

Most vizsgáljunk meg néhány twistortranszformációt egy kissé részletesebben.

Az

$$\tilde{x}^j = x^j + a^j, \quad \tilde{\xi}^A = \xi^A \quad (7.12)$$

transzlációból  $-(3.1)$  és  $(3.2)$  jelöléseit alkalmazva] azt kapjuk, hogy

$$(\tilde{X}^{\alpha}) = (\xi^A, \eta_{A'} - i\xi^B a_{BA'}),$$

ahonnan<sup>30</sup>

$$(t_{\beta}^{\alpha}) = \begin{bmatrix} -\varepsilon_{\beta}^A & 0 \\ -i a_{A'B} & \varepsilon_{A'B'} \end{bmatrix}. \quad (7.13)$$

A Lorentz-forgást

$$\tilde{x}^{JJ'} = x^{KK'} b_K^J \tilde{b}_{K'}^{J'}, \quad \tilde{\xi}^A = \xi^B b_B^A, \quad (7.14)$$

adja, ahol  $(b_B^A)$  egységmodulusú. Ebből

$$(\tilde{X}^{\alpha}) = (b_B^A \xi^B, -\bar{b}_{A'B'} \eta_{B'}),$$

ahonnan

$$(t_{\beta}^{\alpha}) = \begin{bmatrix} b_B^A & 0 \\ 0 & -\bar{b}_{A'B'} \end{bmatrix}. \quad (7.15)$$

Ha (7.14)-et (7.12)-vel, (7.15)-öt pedig (7.13)-mal kombináljuk, megkapjuk az általános korlátozott Poincaré-transzformációit:

$$\tilde{x}^{JJ'} = x^{KK'} b_K^J \bar{b}_{K'}^{J'} + a^{JJ'}, \quad \tilde{\xi}^A = \xi^B b_B^A \quad (7.16)$$

<sup>30</sup> A spinorindexek eltolt elrendezése arra szolgál, hogy a balkéz felé eső indexszel a sorokat, a jobbkez felé eső indexszel pedig as oszlopokat jelezhessük. Hogy a jelölésben következetesek maradjunk,  $\delta_{\beta}^{\alpha}$  helyett itt  $-\varepsilon_{\beta}^{\alpha}$ -t és  $\delta_{A'B'}$  helyett  $\varepsilon_{A'B'}$ -t használunk, bár ezek számértéküket tekintve egyenlők!



(jelen esetben „inhomogén  $SL(2, C)$  transzformáció”<sup>10</sup>), amelyet

$$(t_{\beta}^{\alpha}) = \begin{bmatrix} b^A_B & 0 \\ -id_{CA'} b^C_B & -b_{A'B'} \end{bmatrix} \quad (7.17)$$

állít elő, és így a (7.17) mátrixok a Poincaré-csoportnak egy (két értékű) reprezentációját adják.

Az

$$\tilde{x}^j = 2a^2 x^j (x^k x_k)^{-1} \quad (7.18)$$

inverziót ( $a^4 > 0$ ) megkapjuk, ha alkalmazzuk a  $\tilde{\xi}^{A'} = a^{-1} \eta^{A'}$ ,  $\tilde{\eta}_A = -a \xi_A$  helyettesítést, azaz

$$\tilde{X}_\alpha = (-a \xi_A, a^{-1} \eta^{A'}),$$

mivel ez megegyezik (3.2)-vel és így (3.10)-zel. Így ebben az esetben

$$(u_{\alpha\beta}) = \begin{bmatrix} a \varepsilon_{AB} & 0 \\ 0 & a^{-1} \varepsilon_{A'B'} \end{bmatrix}. \quad (7.19)$$

Itt vagy az idő irányítása ( $a^2 > 0$ ), vagy a tér irányítása ( $a^2 < 0$ ) változik ellenkezőjére, így nem (7.1)-et, hanem (7.10)-et kapjuk. Az időtükrözés:

$$\tilde{x}^j = -x^j, \quad \tilde{\xi}^A = -\xi^A \quad (7.20)$$

adott, ha

$$\tilde{X}^\alpha = (-\xi^A, \eta_{A'})$$

és így<sup>30</sup>

$$(t_{\beta}^{\alpha}) = \begin{bmatrix} \varepsilon^A_B & 0 \\ 0 & \varepsilon_{A'B'} \end{bmatrix}. \quad (7.21)$$

Térttükrözés, vagy időtükrözés esetében be kell vezetnünk az origóban egy  $v^j$  időszerű vektort. Kényelmi szempontból  $v^j$ -t úgy normáljuk, hogy hossza  $\sqrt{2}$  legyen és így

$$\tilde{x}^j = \mp x^j \pm v^j v_k x^k; \quad v_k v^k = 2. \quad (7.22)$$

A felső előjel a tértükrözésre, az alsó előjel az időtükrözésre vonatkozik. Spinorokkal felírva

$$\tilde{x}^{JJ'} = \pm x^{KK'} v_K^{J'} v_{K'}^J; \quad \tilde{\xi}^{A'} = \xi^B v_B^{A'}, \quad \tilde{\eta}_A = \pm \eta_{B'} v_{A'}^{B'},$$

ahol  $v_A^{B'} v_{B'}^C = -\delta_A^C$ . Így

$$\tilde{X}_\alpha = (\pm v_A^{B'} \eta_{B'}, v_B^{A'} \xi^B)$$

és így

$$(u_{\alpha\beta}) = \begin{pmatrix} 0 & \pm v_A^{B'} \\ v_{A'}^B & 0 \end{pmatrix}. \quad (7.23)$$

Figyeljük meg, hogy  $u_{\alpha\beta}$  a tértükrözésre *szimmetrikus*, időtükrözésre pedig *antiszimmetrikus*. Szem előtt tartandó az is, hogy  $u_{\alpha\beta}$  antiszimmetrikus a (7.18) inverzióra [lásd (7.19)-et]. Ez azért jelentős, mert  $C$ -ben két különböző fajta projektív korreláció van, amely involutív (azaz négyzetük azonosság), nevezetesen egy kvadratikusan felültre vonatkozó polaritás (ami a szimmetrikus  $u_{\alpha\beta}$ -nak felel meg) és egy lineáris komplexre<sup>26</sup> vonatkozó null-polaritás ( $u_{\alpha\beta}$  antiszimmetrikus). A null-polaritást az különbözteti meg, hogy  $C$  bármelyik pontja *rajta* fekszik azon a síkon, amelybe transzformálódik; ebből következik, hogy  $M$  bármelyik fényszerű vonala metszi azt a fényszerű vonalat, amelybe transzformálódik. Tehát az imént tárgyalt időtükrözés



vagy inverzió esetein kívül  $u_{\alpha\beta}$  antiszimmetrikus a síkbeli tértükrözés esetében is (vagyis egy időszerű hipersíkban). A lineáris komplex minden esetben a korrelációval szemben invariáns,  $C$ -ben levő vonalrendszer. Ezen vonalak közül néhány  $N$ -ben fekszik, mégpedig azok, amelyeknek  $M$ -beli megfelelőik a transzformáció hatására invariánsak. Ezek a pontok  $M$ -ben *hipergömböt* alkotnak, s ez térszerű (ugyanúgy, mint (7.18)-ban  $a^2 > 0$  esetén vagy (7.22)-ben az alsó előjel figyelembevételkor), ha időtükrözés történik vagy időszerű (pl. (7.18)-ban  $a^2 < 0$  esetén), ha a térbeli irányításban történik változás. (A hipersíkot úgy kell tekintenünk, mint egy  $M$ -ben levő hipergömböt.) Azok a transzformációk, melyek hatására  $u_{\alpha\beta}$  *szimmetrikus* az origóban (pontosabban: egy időszerű vonalon) levő tértükrözésen kívül tartalmaznak még egy olyan térszerű vonalra való tükrözést, amelyet egy időtükrözés követ. Ezekben az esetekben  $M$  azon pontjait, amelyek a transzformáció hatására invariánsak, a  $C$ -ben levő polaritást definiáló kvadratikussá alak (az egyenlet:  $X^\alpha X^\beta u_{\alpha\beta} = 0$ )  $N$ -ben fekvő alkotói reprezentálják.  $M$  ezen invariáns pontjai vagy időszerű kört (amely egy esetben lehet időszerű egyenes vonal), vagy térszerű körpár (egy esetben lehet térszerű egyenes vonal és egy végtelen távoli kör együtt).

$C$  involutív projektív ponttranszformációit harmonikus perspektíváknak<sup>26</sup> nevezzük. Ezek két fő osztályba sorolhatók aszerint, hogy  $C$  invariáns pontjai két kitérővonalat (ha  $t_\alpha^z = 0$ ), vagy egy pontot és egy síkot képeznek ( $t_\alpha^z = \pm 2, \pm 2i$ ). Az *első* osztály ismét felosztható aszerint, hogy a két kitérővonal mindegyike  $N$ -ben fekszik, mindkettő átmegy  $N$ -en, vagy az egyik  $C^+$ -ban, a másik  $C^-$ -ban fekszik. (Más eset nem lehetséges.) Ha mindkét vonal  $N$ -en fekszik, akkor ezek  $M$  két speciális invariáns pontjának felelnek meg. Az  $M$ -ben levő térszerű 2-gömb, amely ezen két speciális pont fénykúpjainak metszete, szintén invariáns pontokból áll. Egy ilyen típusú transzformációra példa lehet a (7.20)  $O$  origóra való téridő-tükrözés (ahol  $O$  és  $I$  a speciális invariáns pontok és az invariáns „2-gömb” a végtelenben van), vagy egy síkra való tükrözés időmegfordítással együtt (ebben az esetben a sík az invariáns „2-gömb” és mindkét speciális invariáns pont a végtelenben van). Ha mindkét kitérővonal átmegy  $N$ -en, akkor invariáns pontok időszerű 2-gömbjét kapjuk  $M$ -ben (pl. egy vonalra való közös tükrözés esetén egy időszerű 2-síkot). Ha egyik kitérővonal sem metszi  $N$ -et, akkor  $M$ -ben *egyetlen* invariáns pont sincs [pl. a (7.18)-as inverziót  $a^2 > 0$  esetén a (7.22) időtükrözés követi]. A *második* osztály transzformációi is érdekesek, mert itt  $M$  egyetlen pontja sem marad invariáns. A  $C$  invariáns pontjait tartalmazó  $R$  sík  $N$ -et a pontoknak olyan halmazában metszi, amely egy Robinson-nyalábot reprezentál. A Robinson-nyaláb vonalai mind invariánsak a transzformáció hatására, de nem pontról pontra invariánsak. Vannak olyan nem-involutív transzformációk is, amelyek rendelkeznek ezzel a tulajdonsággal. Ezek szoros kapcsolatban vannak a twistorokkal és azok *négy-értékűségével*, ezért most röviden ismertetjük őket.

Vegyük egy  $R_x$  jobbsodrású twistort, amelyet úgy normáltunk, hogy

$$R_x \bar{R}^x = 1.$$

Definiáljuk a

$$t(\theta)_\beta^\alpha = e^{i\theta}(\delta_\beta^\alpha - \bar{R}^x R_\beta) + e^{-3i\theta} \bar{R}^x R_\beta \quad (7.24)$$

transzformációt minden valós  $\theta$ -ra. Ekkor  $t(\theta)_\beta^\alpha$  kielégíti a (7.4)-et és (7.6)-ot, és így megengedett twistortranszformáció.

$$t(\theta)_\beta^\alpha t(\varphi)_\gamma^\beta = t(\theta + \varphi)_\gamma^\alpha$$



is fennáll, s így ezek a transzformációk a twistortranszformációk egyparaméteres alcsoportját képezik. Az  $R$  Robinson-nyaláb bármelyik  $L$  vonalát  $M$ -ben egy  $L^x$  twistorral reprezentálhatjuk, amely kielégíti  $L^x R_x = 0$  (és  $L^x L_x = 0$ ) egyenletet. Így

$$t(\theta)_\beta^x L^\beta = e^{i\theta} L^x,$$

s ezért  $R$  minden vonalának invariánsnak kell lennie a transzformáció hatására. Továbbá a

$$\theta = \frac{1}{2} n\pi, \quad (n = \dots, -2, -1, 0, 1, 2, \dots)$$

értékek kivételével, mivel ezekre  $t(\theta)_\beta^x$  arányos  $\delta_\beta^x$ -val.  $M$ -nek egyetlen olyan pontja sincs, amely a transzformáció hatására invariáns volna. (Ez azért van így, mert a  $C$  képben azok a vonalak invariánsak, amelyek vagy átmennek az  $\bar{R}$  ponton, vagy benne fekszenek az  $R$  síkban. Ezek a vonalak azonban egyik esetben sem fekszenek  $N$ -en, mert  $\bar{R}$  nem fekszik  $N$ -en és  $R$  nem érinti  $N$ -et.)

Végül figyeljük meg, hogy  $\theta = \frac{1}{2} \pi$  esetén

$$t\left(\frac{\pi}{2}\right)_\beta^x = i\delta_\beta^x. \quad (7.25)$$

Ez szolgáltatja a transzformációk közül az azonosságot  $C$ -n és így az azonosság transzformációját  $M$ -en is. Azonban  $i$ -vel szoroz minden  $\begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}$  valenciájú twistort. (7.24) figyelembevételével (7.25) szintén folytonos az azonosság twistortranszformációval, ha  $0 \leq \theta \leq \frac{1}{2} \pi$ . Ezért a twistorok  $M$  konform transzformációinak hatására természetüknél fogva négyértékűek.

### VIII. A KERR-TÉTEL

Elő akarjuk állítani a Maxwell-egyenletek összes null-típusú megoldását (vagyis  $F_{ij} F^{ij} = 0 = F_{ij} F_{kl} e^{ijkl}$ ) szabad térben. Robinson<sup>31</sup> megmutatta, hogy e feladat redukálható az összes nyírásmentes fényszerű geodetikus nyalábok előállításának kérdésére a téridőben [lásd (5.8)-at]. Ugyanis minden null-térrel asszociálható ilyen-fajta nyaláb és megfordítva: ha adva van egy ilyen nyaláb, akkor tetszőleges komplex függvényekkel meg tudjuk határozni a Maxwell-egyenletek összes megfelelő megoldását. Az eredmények görbült és sima téridőre egyaránt vonatkoznak. Itt csak olyan téridőkkel foglalkozunk, amelyek (konformisan) simák. Ezzel a megszorítással Robinson eredményei érvényesek tetszőleges spinű ( $> 1/2$ ), zérus nyugalmi tömegű null-terek-(mezők)re. Ha a spin 2, akkor az eredmény összefügg az Einstein-féle nem lineáris téregyenletek<sup>31</sup> null-megoldásainak felépítésével.

A feladat hátralevő részének megoldását sima téridőre — ami nem más, mint

<sup>31</sup> I. Robinson és A. Trautman, Proc. Roy. Soc. (London) A265, 463 (1962).



az összes nyírásmentes fényszerű nyaláb felépítése — Kerr<sup>32</sup> egy jelentős tétele szolgáltatja. A tétel a következő egyszerű alakot ölti, ha a twistorokat használjuk.

*M-ben levő fényszerű vonalak egy nyalábja akkor és csak akkor nyírásmentes, ha C-ben előállítható mint N és egy C-beli S komplex analitikus felület metszete (vagy egy ilyen metszet határesete).* (8.1)

A „komplex analitikus” kifejezés itt azt jelenti, hogy  $S - C$  komplex szerkezete értelmében — analitikus és komplex értelemben „felület” (vagyis négy valós dimenziója van). Így (8.1) elárulja nekünk, hogy a nyírásmentesség feltétele [lásd (5.8)-at] tulajdonképpen egy Cauchy—Riemann típusú összefüggés a  $C$  képbén. [A (8.1) végén levő zárójelben foglalt megjegyzést azért írtuk, hogy lehetővé tegyük olyan kivételes esetek számbavételét is, amelyekre vonatkozóan a nyaláb még valós értelemben sem képez analitikus rendszert. Ezek a kivételes esetek — úgy látszik — csak olyankor fordulnak elő, ha a nyaláb rotációja is eltűnik, lásd (5.7)-et.]

Először tegyük fel, hogy a fényszerű vonalak egy nyalábját  $M$ -ben ilyen egyenlet definiálja:

$$\varphi(X^a) \equiv \varphi(\xi^A, \eta_{A'}) = 0, \quad (8.2)$$

ahol  $\varphi$  az  $X^a$  négy komplex változóra nézve analitikus és homogén, és így (8.2) egy  $S$  komplex analitikus felületet definiál  $C$ -ben. Tudjuk, hogy a nyalábnak nyírásmentesnek kell lennie.  $\eta_{A'} = -i\xi^A x_{AA'}$  helyettesítésével a (8.2) egyenlet — (3.2)-höz hasonlóan — fölhasználható arra, hogy meghatározzuk  $\xi^A$ -t, mint  $x_{AA'}$  függvényét egy arányossági tényezőtől eltekintve, azaz, hogy megadjuk  $X$  vonal irányát, mint az  $x^j$  helyvektorú  $X$  pont függvényét. Az Euler-féle feltételt alkalmazzuk  $\varphi$ -re, hogy ( $n$ -ed fokú) homogén legyen:

$$X^a \frac{\partial \varphi}{\partial x^a} \equiv \xi^A \frac{\partial \varphi}{\partial \xi^A} + \eta_{A'} \frac{\partial \varphi}{\partial \eta_{A'}} = n\varphi.$$

Innen (3.2) és (8.2) alapján

$$\xi^A \left( \frac{\partial \varphi}{\partial \xi^A} - i x_{AA'} \frac{\partial \varphi}{\partial \eta_{A'}} \right) = 0,$$

ahonnan

$$\frac{\partial \varphi}{\partial \xi^A} - i x_{AA'} \frac{\partial \varphi}{\partial \eta_{A'}} = \kappa \xi_A \quad (8.3)$$

adott  $\kappa$  mellett. A (8.2)  $x_{AA'}$  szerinti deriváltjának [lásd (5.3)-at] (3.2) és (8.3) alapján szintén el kell tűnnie:

$$\begin{aligned} 0 &= \nabla^{BB'} \varphi = \frac{\partial \varphi}{\partial \xi^A} \nabla^{BB'} \xi^A + \frac{\partial \varphi}{\partial \eta_{A'}} \nabla^{BB'} \eta_{A'} \\ &= \frac{\partial \varphi}{\partial \xi^A} \nabla^{BB'} \xi^A + \frac{\partial \varphi}{\partial \eta_{A'}} (-i x_{AA'} \nabla^{BB'} \xi^A - i \xi^A \nabla^{BB'} x_{AA'}) \\ &= \kappa \xi_A \nabla^{BB'} \xi^A - i \frac{\partial \varphi}{\partial \eta_{B'}} \xi^B. \end{aligned}$$

<sup>32</sup> R. P. Kerr közlése; lásd még R. P. Kerr, Phys. Rev. Letters 11, 238 (1963); R. P. Kerr és A. Schild (előadását) a „Proceedings of the American Mathematical Society Symposium, April 1964”-ben. Kerr eredeti megfogalmazása szerint egy általános, nyírásmentes fényszerű geodetikusnyalábot a  $\Phi(\eta, x^{00'} + \eta x^{10'}, x^{01'} + \eta x^{11'}) = 0$  analitikus reláció definiál, ahol  $dx^{00'} + \eta dx^{10'} = 0 = dx^{01'} + \eta dx^{11'}$ .



Ha feltesszük, hogy  $\kappa \neq 0$ , akkor  $\xi_B$ -vel való kontrakció után azt kapjuk, hogy  $\xi_B \xi_A \nabla^{BB'} \xi^A = 0$ , ez pedig nem más, mint a  $\xi^A$ -val definiált fényszerű irányokra vonatkozó (5.8) feltétel, ami azt mondja ki, hogy ezek — amint akartuk — érintői lesznek a *nyírásmentes* fényszerű egyeneseknek. Végül  $\kappa$  *nem tűnhet el*, ha (8.2) igazán feltételt jelent  $\xi^A$ -ra, mivel (8.3) bal oldala nem más, mint  $\varphi$ -nek  $\xi^A$  szerinti deriváltja és  $\varphi$ -ről feltettük, hogy  $\xi^A$  és  $x_{AA'}$  függvénye.

Az eredmény megfordítása, vagyis az, hogy (8.2) az  $M$  *legáltalánosabb* nyírásmentes nyalábját reprezentálja, nem ennyire egyszerű, mert vannak kivételes esetek. Ha azonban feltesszük, hogy a nyaláb *valós értelemben analitikus* —, és minden nem analitikus (feltehetően szükségképp rotációmentes) nyaláb tetszőleges pontossággal közelíthető analitikus nyalábokkal — akkor az (5.8) kifejezésből láthatjuk, hogy a nyalábot *meghatározzák* a vonalak (vagyis a  $\xi^A$ -k) irányai  $M$  bármelyik  $F$  *tér-szerű 2-gömbjén*. [Ha  $\xi^0/\xi^1 = \xi$ , akkor az (5.8) kifejezés alakja  $\partial \xi / \partial x^{00'} = -\xi \partial \xi / \partial x^{10'}$ ,  $\partial \xi / \partial x^{11'} = -\xi^{-1} \partial \xi / \partial x^{01}$ . Ez  $\xi$  terjedését definiálja az  $x^{00'} = x^{11'} = 0$  2-síkból kiindulva. A  $\xi$  ezen a 2-síkon — ami az  $M$  szemszögéből nézve 2-gömb — tetszőlegesen megadható az  $x^{01'}$  komplex változó, valamint ennek konjugált komplexe,  $x^{10'}$ , függvényeként.] Az  $F$  2-gömb két  $M$ -beli ( $A$ , ill.  $B$  csúcsú) fénykúp metszete, és így a  $C$ -képben két olyan  $N$ -ben fekvő vonallal reprezentálható, amelyek metszik  $N$ -ben az  $A$  és  $B$  ferde vonalakat.  $F^*$  jelenti a *komplexesített*  $F$ -et, amit a  $C$ -képben mindazon  $C$  vonalak rendszere reprezentál, amelyek mind  $A$ -t, mind  $B$ -t metszik. Most (az  $M$ -képben)  $F$  *valós környezete*<sup>10</sup>  $F^*$ -nak, és így bármely komplex analitikus függvény  $F$ -en egyértelműen folytatódik egy komplex analitikus függvényben  $F^*$ -on. A kongruencia fényszerű irányait, amelyek  $F$  pontjaiban definiálva vannak, a  $C$ -képben az  $F$  rendszer egyenesein fekvő  $\infty^2$  pontrendszer reprezentálja (ami egy *valós* analitikus felületet ír le). Ezek egyértelműen folytatódnak az  $F^*$  rendszer vonalain és egy  $\infty^4$  dimenziójú  $S$  pontrendszeren (és itt egy *komplex* analitikus felületet írnak le). Ekkor  $S$ -nek és  $N$ -nek metszete — amint akartuk — az adott nyírásmentes nyalábot definiálja (mivel az  $S$ -sel definiált nyaláb megegyezik azzal, ami az  $F$ -en van).

A Kerr-tétel igen alkalmas eszköz arra, hogy az  $M$ -ben levő nyírásmentes fényszerű nyalábok szerkezetét általánosságban tanulmányozzuk. Itt csak néhány eredményre utalunk röviden. Például: egy nyírásmentes fényszerű nyaláb azon fény-szerű vonalait, amelyek mentén a *rotáció eltűnik*,  $C$ -ben azok a pontok reprezentálják, ahol  $N$  vonalai érintik  $S$ -et. Általában fel tudjuk írni  $S$  reciprokát<sup>26</sup>,  $\bar{S}$ -t, az  $N$ -nel definiált hermitikus korrelációra vonatkozólag (ami tulajdonképpen az  $S$  pontjaihoz tartozó,  $N$ -re vonatkozó polársíkok burkolója). Tehát  $S$  olyan nyírásmentes fényszerű nyalábot definiál  $M$ -ben, amely bizonyos értelemben „reciproka” az eredetinek. *Mindenütt rotációmentesek* azok a nyalábok, amelyek *önmaguk reciprokai* (de a nyaláb egy-egy vonala általában nem reciproka önmagának). Ebben az esetben  $S$  olyan *zárt felület*  $C$ -ben, amelyek alkotói  $\infty^1$  dimenziósak és  $N$ -ben fekszenek. Ennek a  $\infty^1$  dimenziós rendszernek  $M$ -ben egy *görbe* felel meg, a nyaláb vonalai pedig éppen azok a fényszerű vonalak, amelyek metszik ezt a görbét.<sup>33</sup> Ez a görbe  $M$ -ben *fényszerű*, ha a zárt felület  $C$ -ben *sorba fejtethető*.

<sup>33</sup> Itt a forgásmentes, nyírásmentes fényszerű nyalábok — amelyek valós értelemben *nem* analitikusak — úgy jelennek meg, mint a fényszerű vonalaknak egy olyan rendszere, amely  $M$ -ben egy nem analitikus görbét metsz.



Különös érdeklődésre tarthatnak számot az *algebrai* nyírásmentes fényszerű nyalábok.<sup>34</sup>  $S$  ebben az esetben egy *algebrai* alsokaság<sup>26</sup> és  $\varphi$  a

$$\varphi(X^\alpha) \equiv S_{\alpha\beta\dots\delta} X^\alpha X^\beta \dots X^\delta = 0 \quad (8.4)$$

homogén polinom, ahol  $S_{\alpha\beta\dots\delta}$  szimmetrikus és valenciája  $\begin{bmatrix} 0 \\ n \end{bmatrix}$ .

$\xi^A$  és  $\eta_{A'} = -i\xi^A x_{AA'}$  felhasználásával (8.4)-ből

$$\xi^A \xi^B \dots \xi^D \Phi_{AB\dots D} = 0 \quad (8.5)$$

egyenletet kapjuk, amelyben a  $\Phi_{AB\dots D}$  spinorteret a

$$\begin{aligned} \Phi_{AB\dots D} = & \overset{0}{\sigma}_{(AB\dots D)} + \overset{1}{\sigma}_{A'(B\dots D} x_{A'}^{A'} + \dots \\ & + \overset{n}{\sigma}_{A'B'\dots D'} x_{(A}^{A'} x_{B}^{B'} \dots x_{D)}^{D'} \end{aligned} \quad (8.6)$$

definiálja. Itt a  $\overset{r}{\sigma}_{\dots}$ -ek konstansok, amelyek lényegében az  $S_{\alpha\beta\dots\delta}$  együtthatók. (A kerek zárójelek szimmetrizálást jelölnek.) A  $\Phi_{AB\dots D}$  szimmetrikus kielégíti (8.6) alapján a

$$\nabla_{(E}^{E'} \Phi_{AB\dots D)} = 0 \quad (8.7)$$

„téregyenletet” és van egy

$$\Phi_{AB\dots D} = \overset{1}{\xi}_{(A} \overset{2}{\xi}_{B} \dots \overset{n}{\xi}_{D)} \quad (8.8)$$

„kanonikus felbontása”<sup>7</sup>, ahol a (8.8)-ban szereplő mindegyik  $\xi$  kielégíti (8.5)-öt. Megfordítva: (8.7) mindegyik megoldása (8.6) alakú, és a (8.8) [vagy (8.5)]-ből kapott minden egyes  $\xi$  a megfelelő nyírásmentes nyaláb egy ágát definiálja. Ez általánosítja az V. fejezet ( $n=1$  esetre érvényes) eredményeit és egy (8.7)-et kielégítő szimmetrikus spinortér segítségével megadja egy tetszőleges  $\begin{bmatrix} 0 \\ n \end{bmatrix}$  valenciájú szimmetrikus twistor egy reprezentációját.

Az általános, a null és a zérus nyugalmi tömegű tér Robinson-féle felépítése a velük asszociált nyírásmentes nyalábból szintén könnyen elvégezhető twistorokkal: a teret egy  $S$ -en levő komplex függvénnyel definiálhatjuk. De ezekkel a kérdésekkel itt nem foglalkozunk. A fizikai terek általános leírása twistorokkal egy későbbi cikk témája lesz.<sup>12</sup>

## IX. A TWISTOROK GEOMETRIAI ALKALMAZÁSAI

Az  $M$  és  $C$  geometriai szerkezete közötti kölcsönhatásból számos érdekes geometriai sajáttság ered. Ezek közül néhány annak az egyszerű ténynek a következménye, hogy  $M$  a  $C$ -nek Klein-féle reprezentációja, és így e tulajdonságok lényegében a koordináta-geometria<sup>26</sup> klasszikus eredményei. Mások azonban figyelembe veszik  $M$  valós struktúráját és így a fizikai világ szerkezetével közvetlenebb a kapcsolatuk.

<sup>34</sup> Az ilyen fajta explicit nyírásmentes fényszerű nyalábokat az Einstein-egyenletek explicit megoldásainak előállítására használják. Például a forgó test terének Kerr-féle megoldásaiban  $\varphi(x^\alpha)$  másodfokú. A részleteket illetően lásd a 32. sz. lábjegyzetet.



A  $C$  kép természetes algebráját — vagyis a twistoralgebrát — használhatjuk  $M$  bizonyos geometriai tulajdonságainak levezetésére. Ezek közül néhányat alább közlünk.

Egy  $C$ -ben levő  $r$  dimenziós lineáris teret előállíthatunk egy  $\begin{bmatrix} r+1 \\ 0 \end{bmatrix}$  valenciájú (egyszerű) antiszimmetrikus twistorral vagy ennek  $\begin{bmatrix} 0 \\ 3-r \end{bmatrix}$  valenciájú duálisával ( $r=0, 1, 2$ ). Egy általános antiszimmetrikus twistor és a duálisa közötti kapcsolat a következő:

$$A_{\alpha\beta\gamma} = A^\delta \varepsilon_{\alpha\beta\gamma\delta}, \quad B_{\alpha\beta} = \frac{1}{2} B^{\gamma\delta} \varepsilon_{\alpha\beta\gamma\delta}, \quad (9.1)$$

$$C_\alpha = -\frac{1}{6} C^{\beta\gamma\delta} \varepsilon_{\alpha\beta\gamma\delta}$$

és ezek fordítottja:

$$A^\alpha = -\frac{1}{6} A_{\beta\gamma\delta} \varepsilon^{\alpha\beta\gamma\delta}, \quad B^{\alpha\beta} = \frac{1}{2} B_{\gamma\delta} \varepsilon^{\alpha\beta\gamma\delta} \quad (9.2)$$

$$C^{\alpha\beta\gamma} = \frac{1}{6} C_\delta \varepsilon^{\alpha\beta\gamma\delta}.$$

A (7.7) valamint a (9.1) és (9.2) közötti szimmetria alapján a komplex konjugáció és a duális-képzés művelete kommutálnak. Ha például  $B^{\alpha\beta}$  adott, akkor  $\bar{B}^{\alpha\beta}$  jelentése egyértelmű.  $B^{\alpha\beta}$ -t *valós*nak mondjuk, ha  $B^{\alpha\beta} = \bar{B}^{\alpha\beta}$  (és innen  $B_{\alpha\beta} = \bar{B}_{\alpha\beta}$ ).

A  $P^{\alpha\beta}$  antiszimmetrikus twistorról akkor mondjuk, hogy egyszerű, ha alakja

$$P^{\alpha\beta} = X^\alpha Y^\beta - Y^\alpha X^\beta, \quad (9.3)$$

ebből pedig következik, hogy  $P_{\alpha\beta}$ ,  $\bar{P}^{\alpha\beta}$ ,  $\bar{P}_{\alpha\beta}$  is egyszerűek. ( $C^{\alpha\beta\gamma}$  és  $A_{\alpha\beta}$  szükségképpen egyszerű.) Az előbbiekkal egyértelmű, alternatív feltételek  $P^{\alpha\beta}$  egyszerű voltára:

$$P^{\alpha\beta} P_{\alpha\gamma} = 0 \quad \text{vagy} \quad P^{\alpha\beta} P_{\alpha\beta} = 0. \quad (9.4)$$

(9.3)-ból látható, hogy  $P^{\alpha\beta}$  a  $C$  képben az  $X$  és  $Y$  pontot összekötő vonalat reprezentálja. Az  $M$  képben  $P^{\alpha\beta}$  egy  $P$  komplex pontot állít elő (vagyis  $M^*$  egy pontját). Így  $M^*$ -ban projektív koordináták gyanánt egyszerű antiszimmetrikus  $P^{\alpha\beta}$  twistorokat használhatunk.

Az  $N$ -el definiált hermitikus korreláció így a  $P^{\alpha\beta} \leftrightarrow \bar{P}_{\alpha\beta}$  megfelelést szolgáltatja. Ez  $M^*$ -ban a komplex konjugáció művelete [lásd (7.9)-et], ezért  $M^*$ -ban a komplex konjugációt —  $P^{\alpha\beta}$  koordinátáinak segítségével — a  $P^{\alpha\beta} \leftrightarrow \bar{P}^{\alpha\beta}$  definiálja és  $M$  pontjai akkor adóttak, ha  $P^{\alpha\beta}$  (a fenti értelemben) *valós*. (6.5)–(6.10) alapján  $P^{\alpha\beta}$  segítségével fel tudjuk írni egy  $P$  komplex pont helyvektora  $q^j$  képzetes részének téridő-jellegét:

$$P^{\alpha\beta} \bar{P}_{\alpha\beta} \cong 0 \quad \text{aszerint, hogy} \quad q^j q_j \cong 0 \quad (9.5)$$

és ha  $q^j q_j \cong 0$ , akkor minden  $Z_\alpha$ -ra

$$Z_\alpha \bar{Z}^\beta P^{\alpha\gamma} \bar{P}_{\beta\gamma} \begin{cases} \cong 0, & \text{ha } q^j \text{ jövőbe mutató,} \\ \leq 0, & \text{ha } q^j \text{ múltba mutató.} \end{cases} \quad (9.6)$$



[A  $Z$  síknak a  $P$  vonallal való metszéspontját  $C$ -ben  $Z_\alpha P^{\alpha\gamma}$  reprezentálja, lásd még (6.5), (6.6), (6.8), valamint (6.9)-et.]

$M^*$  egy komplex pontja egy  $M$ -ben levő valós szerkezet segítségével többféleképpen állítható elő: például olyan involutív transzformációval (lásd a VIII. fejezetet), amelyet  $C$ -ben az a harmonikus perspektív reprezentál, melynek tengelyei  $P$  és  $\bar{P}$  egyenesek  $C$ -ben (feltéve, hogy  $P$  és  $\bar{P}$  kitérőek, vagyis  $P_{\alpha\beta}\bar{P}^{\alpha\beta} \neq 0$ ); vagy a Robinson-nyalábok lineáris rendszerével. Azonban szemléletesebb reprezentációt<sup>35</sup> kapunk, ha  $q^j$  térszerű. Ebben az esetben mind a  $P$ , mind a  $\bar{P}$   $C$ -beli vonalak  $N$ -et egy  $\infty^1$  dimenziós pontrendszerben metszik. Az  $M$  képben ezekből két  $\infty^1$  dimenziós fényyszerű vonalrendszer lesz. Ugyanakkor a rendszerhez tartozó két fényyszerű vonal sohasem metszi egymást, de a  $P$  rendszer mindegyik fényyszerű vonala metszi a  $\bar{P}$  rendszer mindegyik fényyszerű vonalát (mert a  $C$  képben a  $P$  vonal minden pontja — a hermitikus korreláció hatására — konjugáltja lesz a  $\bar{P}$  vonal minden pontjának). Az  $M$ -ben levő  $P$  vonalrendszert *nulla-regulusnak*, a  $\bar{P}$  rendszert pedig az előbbi *kiegészítő nulla-regulusának* nevezhetjük. Bármely két egymást nem metsző  $M$ -beli fényyszerű vonal csak egy nullaregulushoz tartozik; e két fényyszerű vonal transzverzálisai alkotják a kiegészítő nullaregulust. Így  $M$  nulla-regulusai geometriailag reprezentálják  $M$  azon pontjait, amelyek helyvektorai térszerű képzetes résszel rendelkeznek.

A  $B^{\alpha\beta} (= \bar{B}^{\alpha\beta})$  valós, antiszimmetrikus, nem egyszerű twistoroknak is közvetlen interpretációja van  $M$ -ben.

$B^{\alpha\beta}$ -t normálhatjuk úgy, hogy

$$B^{\alpha\beta} B_{\alpha\gamma} = \pm \delta^\beta_\gamma \quad (9.7)$$

Így, ha (7.10)-ben a  $B_{\alpha\beta} = \mu_{\alpha\beta}$  helyettesítést alkalmazzuk,  $C$ -ben egy olyan típusú involutív projektív korrelációt kapunk, amelyre vonatkozólag az  $M$ -ben levő invariáns pontok egy hipergömböt alkotnak (lásd a VII. fejezetet). Így  $B^{\alpha\beta}$   $M$ -ben egy hipergömböt reprezentál, ami tér- vagy időszerű aszerint, hogy (9.7)-ben a felső vagy alsó előjel szerepel. (Határesetben — amikor  $B^{\alpha\beta}$  „egyszerűvé” válik — a hipergömbből egy  $B$  csúccsal rendelkező fénykúp lesz.)

Már láttuk hogy  $A^\alpha$   $C$ -ben egy  $A$  pontot állít elő,  $\bar{A}_\alpha$  pedig ennek  $N$ -re vonatkozó „polársíkját” (lásd a VI. fejezetet).  $A$  akkor és csak akkor fekszik  $N$ -en ha  $A^\alpha \bar{A}_\alpha = 0$ , ami annak is feltétele, hogy  $\bar{A}$  érintse  $N$ -et. Ugyanez a feltétel az  $A_{\alpha\beta\gamma}$  duális twistorral felírva a következő:

$$\bar{A}^{\alpha\beta\gamma} A_{\alpha\beta\gamma} = 0. \quad (9.8)$$

$X^\alpha$ ,  $Y^\alpha$ ,  $Z^\alpha$  legyen három (nem zérus) null-twistor és így az  $M$  képben  $X$ ,  $Y$  és  $Z$  három fényyszerű vonal. Legyen

$$\bar{A}^{\alpha\beta\gamma} = X^{[\alpha} Y^\beta Z^{\gamma]}. \quad (9.9)$$

<sup>35</sup> Ha  $q^j$  időszerű, akkor  $P$ -t mint párhuzamosságot reprezentálhatjuk  $M$ -en (torzióval, bal-sodrású, ha  $P \subset C^+$ ) és ez szoros kapcsolatban áll az  $S$ -on levő Clifford-féle párhuzamossággal. A Robinson-kongruenciák közül azokat a *nulla*-irányhalmazokat kell párhuzamosaknak tekinteni, amelyeket a  $C$ -ben levő  $P$  vonalak pontjai reprezentálnak (vagyis a  $\bar{P}$ -n átmenő síkok).  $M$  (konform) mozgásainak tranzitív négyparaméteres csoportja megtartja ezt a párhuzamosságot, nevezetesen azt, amelyiket a (7.1) twistortranszformáció szolgáltat, amelynek hatására a  $P$  vonal pontról pontra invariáns marad. Azonnal látható, hogy ez a csoport az uniter  $(2 \times 2)$ -es mátrixok csoportja, és ezen mátrixok felhasználásával  $M$  pontjainak Uhlmann-féle reprezentációjához (lásd a 18. sz. lábjegyzetet) jutunk.



(A szögletes zárójel ferde szimmetrizálást jelöl.) Az  $M$  képen  $A$  általában egy „komplexesített fényszerű vonal”. Ha azonban (9.8) kielégül, akkor  $A$  valós fényszerű vonal  $M$ -ben, amely metszi mind  $X$ -et, mind  $Y$ -t, mind  $Z$ -t. ( $\bar{A}_\alpha X^\alpha = 0$  abból következik, hogy  $\bar{A}^{[\alpha\beta]} X^{\beta]} = 0$ , stb.) Így annak feltételét, hogy az  $X, Y, Z$  fényszerű vonalaknak közös fényszerű transzverzálisuk legyen, megkapjuk, ha (9.8)-at egyszerűen behelyettesítjük (9.9)-be, vagyis

$$\{XY\}\{YZ\}\{ZX\} = 1, \quad (9.10)$$

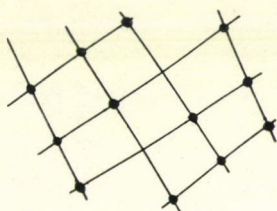
ahol

$$\{XY\} = -(X^\alpha \bar{Y}_\alpha)(Y^\beta \bar{X}_\beta)^{-1} = \{YX\}^{-1}$$

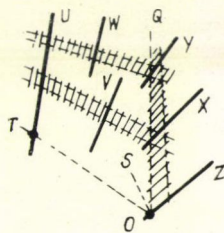
stb., (mivel  $X^\alpha, Y^\alpha$  és  $Z^\alpha$  null-twistorok). Feltesszük, hogy  $X, Y, Z$  közül bármelyik kettő nem metszi egymást, így (9.10) jól definiált. Ha  $X, Y, Z$ -nek két közös transzverzálisuk van, akkor (9.9) eltűnik és  $X, Y, Z$  egy nulla-regulushoz tartozik.

A (9.10) feltételből — az  $M$ -ben levő fényszerű vonalak találkozására vonatkozólag egy sereg geometriai tételt lehet levezetni. Például: ha  $M$ -ben van négy fényszerű vonal, amelyek közül bármely kettő nem metszi egymást, és a vonal-hármasok mindegyik különböző kiválasztásához tartozik egy fényszerű transzverzális, akkor a negyedik vonal-hármashoz is tartozik egy fényszerű transzverzális. (A konfigurációt a 6. ábrán láthatjuk — kivéve azt az esetet, mikor mind a négy vonalhoz egyetlen közös transzverzális tartozik.) Néhány, erre az általános típusra vonatkozó tételt származtathatunk gráfokkal: használhatunk egy háromszögekből álló gráfot, amelyek csúcspontjai az  $M$ -ben levő fényszerű vonalakat reprezentálják. A háromszögek olyan vonalhármasokat képviselnek, amelyeknek közös fényszerű transzverzálisuk van. Ha most bármelyik háromszög zárt görbét reprezentál a rajzon amely lineárisan függ más háromszögekkel adott zárt görbétől, akkor a (9.10) kifejezés alapján egy geometriai tételre jutottunk. A most tárgyalt esetben (lásd a 6. ábrát) a gráf egy tetraéder volna.<sup>36</sup> Ugyancsak a fényszerű vonalakra vonatkozó tételt kapnánk háromszögekből álló, bármilyen más poliéder esetében is.

Végül vizsgáljuk meg egy olyan  $R$  Robinson-nyaláb felépítését, amelynek  $M$ -ben három általános helyzetű  $U, V, W$ , adott fényszerű vonala van. (A  $C$  képen  $R$  az



6. ábra. Az  $M$ -ben levő fényszerű vonalakra vonatkozó geometriai tétel



7. ábra. Az  $U, V, W$  három adott fényszerű vonalat tartalmazó Robinson-nyaláb szerkezete

<sup>36</sup> Mivel egy  $M$ -ben levő fényszerű vonal egy pontot is ábrázol  $C$ -ben és a  $C$ -nek egy, ezen ponton átmenő síkját is, a 6. ábrán látható elrendezést a  $C$ -képben — egy, a geometerek számára ismerős ábra — egymásba és egymás köré írt tetraéder-pár reprezentálja. Megjegyezzük még, hogy ha  $M$  fényszerű vonalát teljesen komplexszé tettük, akkor a  $C$  képen mindig egy pontot és egy azon átmenő síkot kapunk. Ez — mint várható — egy komplex ötdimenziós rendszert szolgáltat.



$U, V, W$  pontokon átmenő sík.)  $R$  azon vonalát akarjuk megszerkeszteni, amely átmegy  $M$ -nek egy általános helyzetű  $O$  pontján. Egy Robinson-nyalábot pedig az jellemez, hogy ha bármely két  $X, Y$  fényszerű vonal a nyalábhoz tartozik, akkor az  $X$ -et és  $Y$ -t tartalmazó nulla-regulus mindegyik vonala oda tartozik. (A  $C$  képben bármely két — egy síkban fekvő — pontot összekötő vonal szintén rajta fekszik a síkon.) Már láttuk hogy az  $X$ -et és  $Y$ -t tartalmazó nulla-regulus nem más, mint a nulla-transzverzálisok azon halmaza, amely az  $X$  és  $Y$  tetszőlegesen kiválasztott nulla-transzverzális párokból áll. Ha tehát találunk egy olyan  $X$ -et és  $Y$ -t, melyek rendre az  $U$ -t és  $V$ -t tartalmazó, illetve az  $U$ -t és  $W$ -t tartalmazó nulla-regulusokhoz tartoznak, mégpedig úgy, hogy az  $X$ -et és  $Y$ -t tartalmazó nulla-regulus egy, az  $O$ -n átmenő  $Z$  vonalat is tartalmaz (lásd a 7. ábrát), akkor a szerkesztés készen van. Tulajdonképpen azt kell megmutatni, hogy van egy olyan  $O$ -n átmenő  $Q$  fényszerű vonal, amely metszi az  $U, V$  regulus egy vonalát ( $X$ -et) és az  $U, W$  regulus egy másik vonalát ( $Y$ -t); vagyis mind az  $U, V, Q$ , mind az  $U, W, Q$  hármasnak kell, hogy legyen egy fényszerű transzverzálisa. Általában egyetlen ilyen  $O$ -n átmenő  $Q$  vonal van tulajdonképpen. Mégpedig azért, mert — alkalmazva a  $Q^\alpha = S^\alpha + \zeta T^\alpha$  helyettesítést (9.10)-ben, ahol  $T$  és  $S$  az  $O$ -n átmenő nulla-vonalak és  $T$  metszi  $U$ -t — két szimultán lineáris egyenletet kapunk  $\zeta$ -ra és  $\bar{\zeta}$ -ra. Annak feltétele, hogy ezeknek az egyenleteknek közös megoldásuk legyen, arra vezet, hogy  $\{UV\}\{VT\}\{TW\}\{WU\} \neq 1$ . Ami, ha  $O$  általános helyzetű, valóban teljesül is.<sup>37</sup>

## X. A METRIKUS TWISTOR

Ha  $M$  (azaz  $M\{I\}$ ) Minkowski-féle metrikus szerkezetét — és nem csupán konform szerkezetét — akarjuk leírni, akkor úgy járhatunk el, hogy bevezetünk egy  $I^{\alpha\beta}$  metrikus twistort, amely az  $M\{I\}$  pontját állítja elő a IX. fejezetben bemutatott módon.  $I^{\alpha\beta}$  tehát egyszerű, antiszimmetrikus és valós (a IX. fejezet értelmében):

$$I^{\alpha\beta} I_{\alpha\gamma} = 0, \quad (10.1)$$

$$I^{\alpha\beta} = \bar{I}^{\alpha\beta} \quad (10.2)$$

(ahol  $I^{\alpha\beta} = -I^{\beta\alpha}$ ). (Azok a twistortranszformációk, amelyek hatására  $I^{\alpha\beta}$  invariáns, a Poincaré-csoportot adják. (Azok a transzformációk, amelyek  $I^{\alpha\beta}$ -t egy arányossági tényezőtől eltekintve változatlanul hagyják, a Poincaré-csoporton kívül a dilatációkat is megadják. Ezek  $M$ -nek éppen azon konform transzformációi, amelyek hatására  $I$  — és fénykúpja — invariáns.)

A de Sitter-féle téridőt is igen egyszerűen tárgyalhatjuk. Ebben az esetben a végtelenben hipergömb van és nem fénykúp. A IX. fejezetben már láttuk, hogy ezt valós, antiszimmetrikus twistorral írhatjuk le, ami nem egyszerű; ez azt jelenti, hogy a (10.1) feltételt elhagyjuk. Más, konformisan sima téridőket is lehet tárgyalni. Ha például (10.1)-et megtartjuk, de (10.2)-t nem [(10.3)-at pedig az abszolút értékével helyettesítjük], le tudjuk írni az Einstein-féle statikus univerzumot. Ezt a témát itt bővebben nem fejtjük ki.

<sup>37</sup> Ez csak abban az esetben nem teljesül, ha van egy olyan  $O$ -n átmenő kör, amely metszi  $U, V$ , és  $W$ -t és rajta fekszik az  $U$ -n átmenő fénykúpon.



Poincaré-féle kovariáns műveleteket úgy származtathatunk, hogy egyszerűen alkalmazzuk a twistoralgebrát és az algebra alapelemeinek (az  $\varepsilon_{\alpha\beta\gamma\delta}$ ,  $\varepsilon^{\alpha\beta\gamma\delta}$ ,  $\delta_{\alpha}^{\beta}$ -n kívül) az  $I^{\alpha\beta}$  és  $I_{\alpha\beta}$  twistorokat vesszük, amelyek kielégítik (10.1)-et és (10.2)-t. Az  $M^*\{I\}$   $P$  pontjait az egyszerű, antiszimmetrikus  $P^{\alpha\beta}$  twistorokkal reprezentálhatjuk, amelyek kényelmi okokból úgy vannak normálva, hogy

$$P^{\alpha\beta} I_{\alpha\beta} = 2 \quad (10.3)$$

( $P \in M\{I\}$ , ha  $P^{\alpha\beta} = \bar{P}^{\alpha\beta}$ .) Így a  $P$  és  $P^{\alpha\beta}$  közötti megfelelés egyértelmű.<sup>38</sup> Ha  $Q^{\alpha\beta}$  és  $R^{\alpha\beta}$  hasonlóképpen pontokat reprezentálnak  $M^*\{I\}$ -ben, akkor egy Poincaré-kovariáns műveletre példa a következő:

$$aP^{\alpha\beta} + bQ^{\alpha\beta} + cR^{\alpha\beta} - \frac{1}{2} \{bcQ^{\gamma\delta} R_{\gamma\delta} + caR^{\gamma\delta} P_{\gamma\delta} + abP^{\gamma\delta} Q_{\gamma\delta}\} I^{\alpha\beta} \quad (10.4)$$

Ez a speciális kifejezés azt jelenti, hogy ha

$$a + b + c = 1 \quad (10.5)$$

akkor (10.4) azt a pontot reprezentálja  $M^*\{I\}$ -ben, amelynek helyvektora  $ap^j + bq^j + cr^j$ , ahol  $p^j$ ,  $q^j$ ,  $r^j$  rendre a  $P$ ,  $Q$ ,  $R$  helyvektora. [Ez a vektorművelet nyilván Poincaré-kovariáns, ha (10.5) fennáll és súlyozott átlagot jelent.] A (10.4) kifejezés egyszerűen általánosítható akárhány pontra. Természetesen megadhatók más, a (10.4)-nél egyszerűbb kifejezések, amelyek  $M\{I\}$ -ben Poincaré-kovariáns műveleteket definiálnak. Például  $P^{\alpha\beta} + aI^{\alpha\beta}$  és  $P^{\alpha\beta} - Q^{\alpha\beta}$  rendre egy hipergömb  $P$  középpontját, illetőleg a  $PQ$ -t merőlegesen metsző hipersíkot reprezentálja. (Ezek a twistorok nem egyszerűek, így nem pontokat, hanem „hipergömböket” állítanak elő.) A (10.4)-ben szereplő együtthatók ellenőrzésére a

$$P^{\alpha\beta} Q_{\alpha\beta} = -(p_j - q_j)(p^j - q^j) \quad (10.6)$$

egyenletet használhatjuk, ami ismert Poincaré-invariáns kifejezés.

A (10.6)-hoz hasonló kifejezések deriválását megkönnyíthetjük, ha még jobban specializáljuk twistorstruktúránkat azzal, hogy bevezetünk egy  $O^{\alpha\beta}$  origó-twistort, amely  $M$ -ben egy speciális  $O$  pontot (origót) reprezentál.  $O^{\alpha\beta}$ -nak itt egyszerűnek, antiszimmetrikusnak, valósnak és (10.3)-nak megfelelően normálnak kell lennie:

$$O^{\alpha\beta} O_{\alpha\gamma} = 0, \quad \bar{O}^{\alpha\beta} = O^{\alpha\beta}, \quad O^{\alpha\beta} I_{\alpha\beta} = 2. \quad (10.7)$$

Ha  $Q^{\alpha\beta} = O^{\alpha\beta}$ -t behelyettesítjük (10.4)- és (10.6)-ba, megkapjuk a lineár kombináció és az abszolút érték négyzetének Lorentz-kovariáns vektorműveleteire vonatkozó twistor kifejezéseket.

Az a transzformációs csoport, melynek hatására mind  $I^{\alpha\beta}$ , mind  $O^{\alpha\beta}$  invariáns, a Lorentz-csoport, ezért várható, hogy az  $O$  origóra vonatkozó spinorokat ki tudjuk majd fejezni twistorok segítségével. Tulajdonképpen a II. és III. fejezetben követett eljárással építjük fel a twistorokat spinorok segítségével, de megfordítva. Így a spinor-

<sup>38</sup> A (9.3) felbontásban szereplő  $X^\alpha$  és  $Y^\alpha$  (melyek szükség esetén pontosan meghatározhatók) gyakorlatban sokszor alkalmasabb koordinátáknak bizonyulnak, mint  $P^{\alpha\beta}$ . Ennek a fizikai terekkel kapcsolatban van jelentősége és tárgyalására másutt kerül sor.



indexek és a „redukált” twistorindexek között egy olyan megfelelést kapunk, amelyre

$$\begin{aligned} O^{\alpha\beta} &\leftrightarrow \varepsilon^{AB}, & I_{\alpha\beta} &\leftrightarrow \varepsilon_{AB} \\ O_{\alpha\beta} &\leftrightarrow \varepsilon_{A'B'}, & I^{\alpha\beta} &\leftrightarrow \varepsilon_{A'B'}. \end{aligned} \quad (10.8)$$

Azok az *ortogonális, idempotens* operátorok, amelyek a twistorteret két spinortér direkt-összegére (egy vesszőtlenre és egy vesszősre) redukálják, a következők:

$$\begin{aligned} J_{\beta}^{\alpha} &= O^{\alpha\gamma} I_{\beta\gamma} \leftrightarrow \delta_B^A = \varepsilon^{AG} \varepsilon_{BG}, \\ \bar{J}_{\beta}^{\alpha} &= O_{\beta\gamma} I^{\alpha\gamma} \leftrightarrow \delta_{A'}^{B'} = \varepsilon^{B'G'} \varepsilon_{A'G'}. \end{aligned} \quad (10.9)$$

(10.1), (10.2), (10.7), stb. alapján

$$\begin{aligned} J_{\beta}^{\alpha} J_{\gamma}^{\beta} &= J_{\gamma}^{\alpha}, & J_{\beta}^{\alpha} \bar{J}_{\gamma}^{\beta} &= 0 = \bar{J}_{\beta}^{\alpha} I_{\gamma}^{\beta}, \\ \bar{J}_{\beta}^{\alpha} \bar{J}_{\gamma}^{\beta} &= \bar{I}_{\gamma}^{\alpha}, & J_{\beta}^{\alpha} + \bar{I}_{\beta}^{\alpha} &= \delta_{\gamma}^{\alpha} \end{aligned} \quad (10.10)$$

Az  $\begin{bmatrix} r \\ s \end{bmatrix}$  valenciájú  $P_{\alpha\beta\gamma\delta}^{\alpha\beta\gamma\delta}$  általános twistor egy  $2^{r+s}$  spinorhalmaznak felel meg. Egy ilyen vektorhoz úgy jutunk, hogy  $P_{\alpha\beta\gamma\delta}^{\alpha\beta\gamma\delta}$  mindegyik indexét egy  $J_{\beta}^{\alpha}$  — vagy egy  $\bar{J}_{\beta}^{\alpha}$ -val kontraháljuk. A keletkező twistor spinort állít elő egy vesszőtlen indexszel, amely mindegyik szabad  $\bar{J}_{\beta}^{\alpha}$  indexnek felel meg és egy *ellenkező helyzetű* vesszős indexszel, amely mindegyik szabad  $J_{\beta}^{\alpha}$  indexnek felel meg. Például

$$P^{\alpha\lambda\mu}_{\phi\chi} J_{\alpha}^{\alpha} \bar{J}_{\lambda}^{\beta} J_{\lambda}^{\gamma} \bar{J}_{\phi}^{\delta} J_{\sigma}^{\alpha} \leftrightarrow \Pi^A_{B'}{}^{GR'}_S.$$

Mivel  $J_{\beta}^{\alpha}$  és  $\bar{J}_{\beta}^{\alpha}$  számára különbözők a lehetőségek,  $2^{r+s}$  különböző spinort kapunk, amelyek (10.10) alapján — együtt határozzák meg  $P_{\alpha\beta\gamma\delta}^{\alpha\beta\gamma\delta}$ -t. Így bármelyik spinorműveletnek  $J_{\beta}^{\alpha}$  és  $\bar{J}_{\beta}^{\alpha}$  segítségével előállíthatjuk twistor-képét. A (10.8) és (10.9) között megfelelés ezzel összhangban van.

A (2.13) és (3.1) alapösszefüggések így fejezhetők ki:

$$X^{\beta} J_{\beta}^{\alpha} \leftrightarrow \zeta^A, \quad X^{\beta} \bar{J}_{\beta}^{\alpha} \leftrightarrow \eta_{A'},$$

$$L^{\beta} J_{\beta}^{\alpha} \leftrightarrow \lambda^A, \quad L^{\beta} \bar{J}_{\beta}^{\alpha} \leftrightarrow \mu_{A'}.$$

Ha

$$\nu P^{\alpha\beta} = X^{\alpha} L^{\beta} - L^{\alpha} X^{\beta}$$

[lásd (9.3)-at], továbbá  $\nu$ -t úgy választjuk meg, hogy (3.1) érvényes legyen, azt kapjuk, hogy  $\nu = \xi_A \lambda^A$ . Ekkor

$$\left. \begin{aligned} P^{\alpha\sigma} J_{\alpha}^{\alpha} J_{\sigma}^{\beta} &\leftrightarrow \varepsilon^{AB} \\ P^{\alpha\sigma} J_{\alpha}^{\alpha} \bar{J}_{\sigma}^{\beta} &\leftrightarrow -i p_{B'}^A, \\ P^{\alpha\sigma} \bar{J}_{\alpha}^{\alpha} \bar{J}_{\sigma}^{\beta} &\leftrightarrow -\frac{1}{2} p_j p^j \varepsilon_{A'B'}, \end{aligned} \right\} \quad (10.11)$$

ahol  $p_{AB'}$  ugyanaz, mint (3.10)-ben. A  $C$  képben  $P$  az  $X$  és  $L$  pontokat összekötő



vonalat jelenti;  $M^*$ -ban  $P$  két („komplexesített”) fényszerű vonal (komplex) metszéspontja. Így  $P$  — (3.19) alapján — a  $P$  pont  $O$ -ra vonatkozó helyvektorát állítja elő  $M$ -ben. (10.11) mátrixalakban felírva:

$$(P^{\alpha\beta}) = \begin{pmatrix} \varepsilon^{AB} & -ip_{B'}^A \\ ip_{A'}^B & -\frac{1}{2} p_j p^j \varepsilon_{A'B'} \end{pmatrix}.$$

A (10.6) és (10.4)-hez hasonló kifejezések ebből közvetlenül adódnak.

### KÖSZÖNETNYILVÁNÍTÁS

A szerző nagyon hálás — e munka kezdeti szakaszában elhangzott gondolatébresztő megjegyzéseikért — különösen *I. Robinson*-nak, *E. L. Schücking*-nek és *R. P. Kerr*-nek.

Ez a munka részben Texas állam Egyetemén készült, részben az Egyesült Államok Légieréjével kötött, AR—AFOSR—454—63. sz. szerződés támogatásával.

*Fordította: Csoma Zsigmond és Jeanplong Józsefné.*







# KÖNYVISMERTETÉS

## W. Koechner: Solid State Laser Engineering Springer Series in Optical Sciences

A szilárd test laserek számtalan gyakorlati alkalmazása szükségessé teszi egy mérnöki kézikönyv megírását, mely összefoglalja azon szerkesztési méretezési eljárások összességét, melyek lehetővé teszik egy jó szilárd test laser tervezését. W. Koechner könyve ennek a feladatnak tesz eleget. A könyv valóban hézagg pótló, hiszen számtalan könyvet találhatunk, mely a laserek fizikai alapjaival, vagy éppen azok alkalmazásaival foglalkozik, de nemigen találni olyat, amelyek a laser szerkesztési részleteivel, technológiai részletekkel ismertetne meg.

A szilárd test laserek típusai, melyek jól meghatározott gyakorlati feladatok megoldására alkalmasak, ma már jól körülhatárolhatóak. Ezen laserek a legrégebben ismert rubin laser, a neodimium üveg laser és az ittrium alumínium gránát vagy röviden YAG laser. Ezen lasereket használjuk mikromegmunkálási célokra laseres távolságmérésre és tárgykövetésre, a laseres fúziós kutatásokra stb. hogy csak néhányat említsünk. Szerkezeti elemei ezen lasereknek: a laser aktív anyaga, a laser rezonatora, a laser aktív anyagát pumpáló optikai rendszer, a hőelvezető rendszer, a laser optikai kapcsolója (Q kapcsoló) stb. mind-mind egy-egy fejezet tárgya. Természetesen külön-külön fejezet foglalkozik a laser működés fizikai alapjainak leírásával, a laserszcillátor és -erősítő működési elveivel, a modus szinkronizációs üzemmóddal, a lasersugárzás által az anyagban kiváltott nem lineáris optikai folyamatokkal (frekvencia duplázás, parametrikus szórások) és ezen folyamatok felhasználásán alapuló optikai eszközökkel (duplázók, parametrikus generátorok). A könyvet a laserek alkalmazásairól, valamint az optikai elemek lasersugár által kiváltott sérüléseiről szóló fejezetek zárják.

A fejezetekben a fizikai alapok rövid érthető vázolója után a közölt, jól használható méretezési eljárások és képletek valóban lehetővé teszik a gyakorlati tervezési munkát. Hiányosságul talán azt lehetne felróni, hogy a laserekben használt elektronikus áramköröknél sokszor csak az elvek felsorolására szorítkozik a szerző és az méretezést ismertnek tételezi fel. Hozzájárult volna az anyag teljességéhez, ha a leginkább bevált áramkörök tervezési szempontjait is leírta volna.

Összességében elmondható, hogy egy nagyon hasznos kézikönyvet kaptunk, melynek magyarrá való fordítása is igen helyes lenne.

(B. J.)

## J. Schnakenberg: Thermodynamic Network Analysis of Biological Systems Springer—Verlag, Berlin 1977.

Pedagógiaiilag is érdekes feladat megoldani egy kérdés tudományos tárgyalását úgy, hogy azt a fizikus hallgatók szakmájuk szempontjából nem unalmasnak, a biológus, orvos hallgatók pedig mégis érthetőnek találják. S természetesen hasonló követelményt kell teljesíteni a biológia oldaláról. Schnakenberg az az elméleti fizikus, aki arra a kérdésre, hogy mi a biofizika? a következő választ kívánja adni: a biofizika feladata kidolgozni olyan elméleti fizikai fogalmakat, és elképzeléseket, amelyek biológiai jelenségek leírására és megmagyarázására alkalmasak. A szó szoros értelemben vett fizikai kutatásokban is az egyes elméletekkel szemben bizonyos fenntartások merülnek fel, még inkább érvényes lehet ez a nem fizikai vagy az interdiszciplináris kutatásokban. Azt sem szabad azonban elfelejteni, hogy a biológiában összegyűlt, viszonylag sok kísérleti eredmény egyenesen „kihívás” arra vonatkozóan, hogy az elméleti fizika erejét ezen kipróbálják. Schnakenberg teljesen világos biofizikai elvek és szemléletek alapján dolgozik, tudja, hogy pl. egy biológiai sejt nem tökéletesen szabályos, mint egy kristály, statisztikusan nem rendezetlen, mint a gázok vagy a folyadékok,



hanem egymással folyadék környezetben, kölcsönhatásban levő szabályos struktúrák nagyon specifikus, változatos összetétele. Ezért nem lehet a biológiai modell természetes folytatása a szilárdtest fizikai modellnek, mint annak nagyobb fokú bonyolultabb változata, nem beszélve arról, hogy a biológiai struktúrákra vonatkozó ismereteink nagyon szegényesek. Így a biológiai rendszerek olyan „fekete doboznak” foghatók fel, amely nagy belső molekuláris szabadságfokú, azaz termodinamikai rendszer. Ez utóbbi jelző azt jelenti, hogy nem érdeklődünk a molekuláris szabadságfok egyéni dinamikája, hanem csak sok olyan kisebb makroszkopikus folyamat felől, amelyek a fekete dobozon kívül tanulmányozhatók. Ezek viszont a termodinamika törvényeinek vannak alávetve, amelyeket e könyv kizárólag tárgyalási anyaga szempontjából ismertet. Használ egy modell-nyelvet, amelyet Oster, Perelson és Katchalsky ajánlott 1973-ban: hálózati termodinamika. Ennek ismertetése után a többi fejezet erre a nyelvre fordítja át a biológiai modellekre már eddig elfogadott fogalmakat, törekedve ezen a nyelven új modelleket is alkotni.

(T. Gy.)



Technikai szerkesztő: Turchányi György  
A kiadásért felelős az Akadémiai Kiadó igazgatója — Műszaki szerkesztő: Budai László  
A kézirat beérkezett: 1977. IX, 25. — Terjedelem: 5,85 (A/5) iv  
77-4225 — Szegedi Nyomda — F. v.: Dobó József







A MAGYAR  
TUDOMÁNYOS AKADÉMIA  
MATEMATIKAI ÉS FIZIKAI TUDOMÁNYOK  
OSZTÁLYÁNAK

# KÖZLEMÉNYEI

Matematikai, fizikai, csillagászati dolgozatokat, referátumokat, könyvismertetéseket, a Tudományos Minősítő Bizottságnak a III. Osztályra vonatkozó híreit s a III. Osztály híreit közli. Évenként egy kötet (kb. 40 ív) jelenik meg (négy szám alkot egy kötetet).

A Közlemények előfizetési ára kötetenként, azaz évenként 60 Ft. Belföldi megrendelések az Akadémiai Kiadó, 1363 Budapest V., Alkotmány u. 21. (pénzforgalmi jelzőszámunk 215-11 488), külföldi megrendelések a „Kultúra” Könyv- és Hírlap Külkereskedelmi Vállalat, 1011 Budapest I., Fő utca 32. (pénzforgalmi jelzőszám: 218-10 990) útján eszközölhetők.



Ára: 10,— Ft  
Előfizetés kötetenként: 48,— Ft

INDEX: 26491 ISSN 0025—0104
--------------------------------

## TARTALOM

*Takács Csaba:* Transzportfolyamatok leírása a relativisztikus kontinuumfizikában ..... 379

### A KLASSZIKUS IRODALOMBÓL

*R. Penrose:* Twistor-algebra ..... 405

### KÖNYVISMERTETÉS

*E. Koechner:* Solid State Laser Engineering ..... 443

*J. Schnakenberg:* Thermodynamic Network Analysis of Biological System ..... 443

1828—1978

MEGJELENT AZ AKADÉMIAI KÖNYVKIADÁS 150. ÉVÉBEN



307.226

IV

# MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

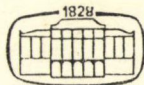
A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA  
III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

KOVÁCS ISTVÁN, NAGY ELEMÉR,  
PÁL LÉNÁRD ÉS SZALAY SÁNDOR  
KÖZREMŰKÖDÉSÉVEL

SZERKESZTI  
JÁNOSSY LAJOS

XXV. KÖTET

6. FÜZET



AKADÉMIAI KIADÓ  
MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA  
BUDAPEST 1977

9



# MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT

## A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA III. OSZTÁLYÁNAK FIZIKAI KÖZLEMÉNYEI

KIADÓHIVATAL: 1363 BUDAPEST V., ALKOTMÁNY UTCA 21. SZ.

A Magyar Fizikai Folyóirat a magyar fizikus kutatók lapja. A lap célja a magyar fizikai kutatás korszerű szinten való támogatása, elsősorban összefoglaló jellegű cikkek, tanulmányok stb. közlése által. Ilyen dolgozatok megjelentetésével a lap tájékoztatást kíván nyújtani a fizika különböző kutatási területeinek jelenlegi eredményeiről, problémáiról, további célkitűzéseiről. A lap „A klasszikus irodalomból” című rovatában rendszeresen közöl egy-egy téma köré csoportosított, immár klasszikussá vált cikkeket, amelyek a témakör befejezése, átlagosan 10–10 dolgozat megjelenése után a folyóiratfüzetekről leválasztva, az alsó lapszámozás szerint összekötve, önálló köteteket képeznek. A folyóiratból évenként egy kötet jelenik meg hat füzetben, füzetenként átlag 6 ív terjedelemben.

A kéziratok a következő címre küldendőek:

Jánossy Lajos akadémikus  
1121 Budapest XII., Konkoly Thege út  
Központi Fizikai Kutató Intézet

Ugyanerre a címre küldendő minden szerkesztőségi levelezés.

A közlésre el nem fogadott kéziratokat a szerkesztőség lehetőleg visszajuttatja a szerzőkhöz, de felelősséget a beküldött, el nem fogadott kéziratok megőrzéséért vagy továbbításáért nem vállal.

A folyóirat előfizetési ára kötetenként 48 Ft. Belföldi megrendelések az Akadémiai Kiadó, 1363 Budapest V., Alkotmány utca 21. (pénzforgalmi jelzőszámunk 215-11 488), külföldi megrendelések a „Kultúra” Könyv- és Hírlap Külkereskedelmi Vállalat, 1389 Budapest I., Fő utca 32. (pénzforgalmi jelzőszám: 218-10 990) útján eszközölhetők.

A kéziratokkal kapcsolatban a szerkesztőség a következőket kéri a szerzőktől:

1. A dolgozat elé rövid tartalmú ismertetőt írnak.
2. A levezetéseknek csak a gondolatmenetét és főbb lépéseit közölnék. Ha részletezésre lesz szükség, a szerkesztőség azt külön fogja kérni.
3. A kéziratokat gépelve, egy oldalra írva, 4 cm-es margóval, kettős sorközzel készítsék el.
4. Az ábrákat ceruzával, sima fehér papírra rajzolják. A nyomda számára a rajzok elkészítését a Kiadó vállalja.
5. Az ábrák alá rövid magyarázószöveget írnak.
6. A kéziratban az érvényben levő kiadói előírások szerint adjanak szedési útmutatásokat.
7. A szövegben az irodalmi utalásokat szögletes zárójelbe tegyék. Az irodalmi adatok megadásakor a folyóiratban kialakult formát használják.



# A BIOSZFÉRA RADIOAKTÍV SZENNYEZŐDÉSÉT BEFOLYÁSOLÓ EGYES TÉNYEZŐK VIZSGÁLATA\*

SZABÓ ANDRÁS

Megyei Élelmiszerellenőrző és Vegyvizsgáló Intézet, Győr\*\*

A dolgozat tárgya a levegő—víz—talaj—növény—állat—ember biológiai lánc radioaktív szennyezettségét befolyásoló legfontosabb tényezők vizsgálata. A tartós sugárszennyezettséget okozó  $^{90}\text{Sr}$  és  $^{137}\text{Cs}$  izotópokra vonatkozóan elemzi a földrajzi elhelyezkedés, az éghajlati viszonyok, a talaj mechanikai szerkezete és kémiai összetétele, az alkalmazott agrotechnikai eljárások, a növény fajtája és kora, az alkalmazható dekontaminációs módszerek, az állat fajtája és kora, valamint az ember életkora és táplálkozási szokásai s a radioaktív kontamináció közötti összefüggést.

## TARTALOMJEGYZÉK

Bevezetés .....	445
A radioaktív szennyezettség kialakulása .....	446
A bioszférát szennyező aktív izotópok .....	448
A bioszféra radioaktív szennyeződését befolyásoló tényezők .....	449
A terület földrajzi elhelyezkedése és a radioaktív kontamináció közötti összefüggés .....	450
Az éghajlati, meteorológiai viszonyok s a radioaktív kontamináció közötti összefüggés .....	451
A talaj mechanikai szerkezete és a radioaktív kontamináció közötti összefüggés .....	452
A talaj kémiai összetétele s a radioaktív kontamináció közötti összefüggés .....	454
Az alkalmazható agrotechnikai eljárások hatása a radioaktív szennyezettségre .....	456
A növény fajtája és kora, valamint a radioaktív szennyezettség közötti összefüggés .....	457
Dekontaminációs eljárások .....	459
Az állat fajtája és kora, valamint a radioaktív kontamináció közötti összefüggés .....	460
Az életkor és a táplálkozási szokások hatása az emberi szervezetben inkorporálódó radioaktív anyagok mennyiségére .....	463
Összefoglalás .....	466
Irodalom .....	467

## Bevezetés

A bioszféra szennyezettségének vizsgálata s a szennyezettség mértékének csökkentése napjaink egyik legfontosabb világméretű problémája. A nukleáris energia s a radioaktív izotópok egyre nagyobb mérvű felhasználása következtében fontos szerepet kap környezetünk radioaktív kontaminációjának ellenőrzése is.

Az emberi szervezetet érő sugárterhelés természetes és mesterséges eredetű lehet. Természetes eredetű sugárterhelést okoz az ún. föld-sugárzás (radioaktív kőzetek

\* A dolgozat az ELTE-n 1975-ben megvédett egyetemi doktori disszertáció lényegesebb eredményeit tartalmazza.

\*\* Jelenleg: Egyesített Atommagkutató Intézet, Neutronfizikai Laboratórium, Dubna  
Érkezett 1976. dec. 14.



sugárhatása), a kozmikus sugárzás, s ide sorolható az élelmiszerekben, ivóvízben, levegőben jelenlevő, s azokból a szervezetbe jutó természetes eredetű radioaktív izotópok ( $^{40}\text{K}$ ,  $^{226}\text{Ra}$ ,  $^{222}\text{Rn}$  stb.) hatása is. A mesterséges eredetű sugárterhelést — nem tekintve a sugárveszélyes munkahelyeken dolgozókat — részben a medicinális eredetű sugárterhelés (röntgenátvilágítások, sugárterápiás kezelések, radiofarmakonok alkalmazása) okozza, részben pedig az atomrobbantási kísérletek következtében s az atomerőművek által a bioszférába juttatott radioaktív anyagok szennyező hatására vezethető vissza. Ugyancsak idetartozik pl. a TV készülékek által kibocsátott röntgensugárzás sugárterhelő hatása is, bár az így kapott dózis a többi komponens által okozott sugárterhelésnél lényegesen kisebb.

A szervezetre különösen az inkorporált, tehát a testbe bejutó, s ott esetleg akkumulálódó aktív izotópok sugárzása veszélyes. Ezek nagy része az élelmiszerekkel és ivóvízzel, kisebb része inhaláció útján a levegőből jut a szervezetbe. Az inkorporált izotópok közül főleg azok veszélyesek, amelyeknek fizikai felezési idejükön kívül a biológiai felezési idejük is hosszú, hisz így a testszövetekbe beépülve tartós sugárterhelést okoznak. Ilyen izotóp pl. a  $^{90}\text{Sr}$ , amely — ellentétben pl. a  $^{137}\text{Cs}$ -mal — a csontszövetekben halmozódik fel, s így biológiai felezési ideje lényegesen hosszabb mint a  $^{137}\text{Cs}$ -é. A  $^{137}\text{Cs}$  biológiai felezési ideje 50—150 nap, míg a  $^{90}\text{Sr}$ -é néhány év [1], [2].

Dolgozatomban a levegő—víz—talaj—növény—állat—ember biológiai lánc sugárszennyezettségét befolyásoló tényezők vizsgálatával foglalkozom. Tárgyalom továbbá azokat a módszereket, eljárásokat is, amelyek alkalmazása lehetővé teszi a kontamináció csökkentését.

A környezet radioaktivitásának ellenőrzésével és a dekontaminálás módszereinek kidolgozásával kapcsolatos kutatásoknak az ad kihangsúlyozott jelentőséget, hogy a sugárhatás következtében fellépő genetikai károsodásnak (gén- és kromoszóma-mutációk) nincs küszöbdózisa, tehát a szervezetet érő legkisebb sugárhatás is kiválthat genetikai károsodást. Mivel a génmutációk gyakorisága egyértelműen összefügg a kapott dózissal, ezért fontos feladat a sugárdózis lehetőség szerinti minimalizálása.

### A radioaktív szennyezettség kialakulása

A radioaktív szennyezettség kialakulásában döntő szerepet játszottak a nukleáris robbantások. Nagyenergiájú robbantások alkalmával az atomfelhőben levő anyagok tekintélyes része a sztratoszférába emelkedik, s a lassú kiüledés következtében a radioaktív anyagok Földünk tetszőleges pontjára eljuthatnak. Mivel a radioaktív anyagok a robbantás után 20—25 m/s sebességgel áramlanak az atmoszférában, 1—3 héttel az atomrobbantás után a hasadási termékek jelenléte már elvileg a világ bármely pontján vett levegő- ill. csapadékmintában kimutatható. Az 1964-ben kezdődött kínai atomrobbantási kísérletek hatása pl. az NDK-ban 10—18 nappal a robbantások után már kimutatható volt [3].

Az atomrobbantáskor keletkező radioaktív izotópokat eredetük szerint 3 csoportba soroljuk:

1. a töltet szétszóródott, hasadásban részt nem vett hányada ( $^{238}\text{U}$ ,  $^{239}\text{Pu}$ ),
2. a neutronfluxus hatására a környező anyagokban keletkező aktív izotópok,
3. a hasadási termékek.



Mind veszélyességüket, mind mennyiségüket tekintve ezen izotópok közül a hasadási termékek jelentősége a legnagyobb. A hasadási termékek radioaktivitásának időfüggésére Way és Wigner a következő empirikus formulát javasolta:

$$I_t = I_{t_0} \cdot t^{-x},$$

ahol:

$I_t$  a hasadási termékek radioaktivitása  $t$  idővel a robbantás után

$I_{t_0}$  az aktivitás közvetlenül a robbantás után

$x = 1,2$

Egy preparátum két különböző időpontban ( $t_1$  és  $t_2$ ) végzett aktivitásmérése ( $I_1$  és  $I_2$ ) alapján a  $t_1$  — azaz a robbantás óta eltelt idő — kiszámítható a következő képlettel:

$$t_1 = \frac{t_2 - t_1}{\sqrt{\frac{I_1}{I_2} - 1}}.$$

A Way—Wigner formula alkalmazhatóságát több szerző kísérletileg is alátámasztotta, így pl. Kovács és Szalay [4] az ATOMKI-ben 1952 óta végzett csapadék-aktivitási mérések szerint  $x$  értékét  $1,18 \pm 0,10$ -nek találta, s a képlet alapján 2 nap pontossággal tudták a kísérleti atomrobbantások időpontját megállapítani.

A bioszféra radioaktív anyagokkal való elszennyeződésében az atomerőműveknek is jelentős szerepe van. Egyáltalán nem elhanyagolható az atomerőművek által a levegőbe s a felszíni vizekbe bocsátott radioaktív anyagok mennyisége. Különösen figyelmet érdemel a kérdés akkor, ha figyelembe vesszük, hogy 1980-ra a világ elektromos energiaszükségletének 20, 2000-ben pedig már több mint 50 %-át

## 1. TÁBLÁZAT

16 MW teljesítményű reaktor légszennyező radioaktív emissziója Ci/óra-ban

Légszennyező radioaktív emisszió Ci/h			
gázok		aeroszolok	
<sup>41</sup> Ar	0,88 ± 0,03	<sup>24</sup> Na	(2,2 ± 0,2) · 10 <sup>-6</sup>
<sup>85</sup> mKr	(9,5 ± 0,4) · 10 <sup>-3</sup>	<sup>51</sup> Cr	(1,9 ± 0,1) · 10 <sup>-8</sup>
<sup>87</sup> Kr	(18,6 ± 0,8) · 10 <sup>-3</sup>	<sup>56</sup> Mn	(1,0 ± 0,3) · 10 <sup>-6</sup>
<sup>88</sup> Kr	(17,2 ± 0,9) · 10 <sup>-3</sup>	<sup>60</sup> Co	(9,4 ± 0,5) · 10 <sup>-9</sup>
<sup>135</sup> Xe	(15 ± 5) · 10 <sup>-3</sup>	<sup>65</sup> Zn	(1,8 ± 0,5) · 10 <sup>-8</sup>
<sup>135</sup> Xe	(20,1 ± 1,2) · 10 <sup>-3</sup>	<sup>89</sup> Rb	(2,4 ± 1,3) · 10 <sup>-3</sup>
<sup>138</sup> Xe	(38,7 ± 2,3) · 10 <sup>-3</sup>	<sup>89</sup> Sr	(1,4 ± 0,1) · 10 <sup>-6</sup>
		<sup>90</sup> Sr	(1,3 ± 0,9) · 10 <sup>-8</sup>
		<sup>91</sup> Sr	(1,9 ± 0,2) · 10 <sup>-6</sup>
		<sup>92</sup> Sr	(1,2 ± 0,2) · 10 <sup>-6</sup>
		<sup>99</sup> Mo	(1,5 ± 0,2) · 10 <sup>-8</sup>
		<sup>131</sup> I	(7,9 ± 1,3) · 10 <sup>-8</sup>
		<sup>132</sup> I	(4,6 ± 1,6) · 10 <sup>-8</sup>
		<sup>133</sup> I	(2,2 ± 0,8) · 10 <sup>-7</sup>
		<sup>137</sup> Cs	(4,0 ± 0,4) · 10 <sup>-9</sup>
		<sup>138</sup> Cs	(2,9 ± 1,6) · 10 <sup>-3</sup>
		<sup>139</sup> Ba	(1,9 ± 0,1) · 10 <sup>-5</sup>
		<sup>140</sup> Ba	(1,0 ± 0,2) · 10 <sup>-7</sup>
		<sup>140</sup> La	(6,7 ± 0,8) · 10 <sup>-8</sup>



nukleáris energiából fogjuk fedezni [5]. Egy Szovjetunióban működő 16 MW teljesítményű lassító- és hűtőközegként egyaránt vizet használó atomreaktor légszennyező emisszióját az 1. táblázat mutatja [6].

Megemlítem még, hogy az utóbbi években szinte exponenciálisan nőtt a radioaktív izotópokat felhasználó munkahelyek száma. A nem megfelelő aktív hulladék-kezelés, ill. gondatlanság is okozhat elsősorban helyi kontaminációt.

A radioaktív szennyezettségi szintek alakulásával kapcsolatban a következő lényeges megállapítások tehetők. A nukleáris kísérletekre visszavezethető radioaktív szennyezettség 1962—1965 között érte el a maximumot (1963, Moszkvai atomcsend-egyezmény megkötése), utána a szennyezettség csökkent, s az utóbbi években lényegében konstans szintűnek tekinthető [7], [8], [9], [10]. Itt azonban meg kell jegyeznem, hogy 1976 őszén a kontaminációs szint — a kínai atomrobbantási kísérletek miatt — ismét jelentősen megnövekedett. A radioaktív kontamináció további rendszeres ellenőrzése s az esetleges védelmi intézkedésekre való felkészülés továbbra is indokolt. Ennek okai a következők:

1. Miután a sztratoszférába került radioaktív anyagoknak évente csak mintegy 10 %-a ülepedik ki — tehát a radioaktív kiszóródás „felezési ideje” kb. 7 év —, így a korábbi atomrobbantási kísérletek is okoznak további kontaminációt.
2. Az atomcsend-egyezményhez nem csatlakozó országok (Kína, Franciaország, India, Anglia) továbbra is folytatják a kísérleti robbantásokat.
3. Az atomerőművek rohamosan növekvő száma miatt az atomreaktorok által emitált aktív anyagok mennyisége is nagymértékben nő.

### A bioszférát szennyező aktív izotópok

A bioszféra radioaktív kontaminációját okozó leggyakoribb mesterséges eredetű aktív izotópok s ezek legjellemzőbb tulajdonságai a 2. táblázatban láthatók.

2. TÁBLÁZAT

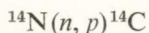
Mesterséges eredetű radioaktív izotópok és jellemzőik

Izotóp	Sugárzási energia (MeV)	Fizikai felezési idő
$^3\text{H}$	0,02 ( $\beta$ )	12,3 év
$^{14}\text{C}$	0,16 ( $\beta$ )	5570 év
$^{85}\text{Kr}$	0,67 ( $\beta$ ) 0,52 ( $\gamma$ )	10,8 év
$^{89}\text{Sr}$	1,46 ( $\beta$ )	50,4 nap
$^{90}\text{Sr}$	0,54 ( $\beta$ )	28 év
$^{131}\text{I}$	0,61 ( $\beta$ ) 0,72 ( $\gamma$ )	8,1 nap
$^{137}\text{Cs}$	0,51 ( $\beta$ )	30 év

A  $^3\text{H}$  a kozmikus sugárzás következtében az atmoszférában természetes úton is képződik. Nagyon megnövelték azonban a bioszférába jutó  $^3\text{H}$  mennyiségét az atomrobbantási kísérletek, s az atomerőműveknek is jelentős a  $^3\text{H}$  emissziója [11]. Magyarországon pl. a felszíni vizek  $^3\text{H}$  aktivitása 1972-ben 580—760 pCi/liter volt [12]. Összehasonlításképpen: 1974-ben az USA-ban a felszíni vizek átlagos  $^3\text{H}$  aktivitása 200 pCi/liter, a tejé 270  $\pm$  210 pCi/liter volt [13], [14].



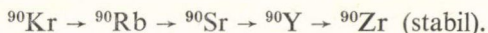
Hasonlóan a tríciumhoz, természetes úton a  $^{14}\text{C}$  is a kozmikus sugárzás hatására képződik. Nukleáris robbantásoknál a  $^{14}\text{C}$  a



magreakcióban keletkezik. 1964-ben a légkör nukleáris kísérletekre visszavezethető szennyezettsége 85 %-a volt a természetes szintnek, azóta ez némileg csökkent [15].

A  $^{85}\text{Kr}$  jelenléte elsősorban az atomreaktorok s a reprocesszáló üzemek emissziójára vezethető vissza. Az utóbbi két évtizedben a levegő  $^{85}\text{Kr}$  tartalma rendkívül erősen nőtt, 1966-ban pl. mintegy húszszorosa volt az 1954-ben mérhető értéknek [16].

A bioszféra radiostroncium szennyezettségének nagy része a nukleáris robbantások hatásának tulajdonítható. A radioaktív stroncium izotópok közül koncentrációját és felezési idejét tekintve a  $^{90}\text{Sr}$  a legveszélyesebb. A  $^{89}\text{Sr}$  viszonylag rövid felezési ideje miatt csak néhány hónapig jelent veszélyt, a  $^{90}\text{Sr}$  azonban hosszú felezési ideje miatt tartós sugárszennyezettséget okoz. A  $^{90}\text{Sr}$  leányeleme a  $^{90}\text{Y}$ , amely a  $^{90}\text{Sr}$ -hoz képest nagyon rövid felezési ideje (64,5 óra) miatt radioaktív egyensúlyban van vele. A  $^{90}\text{Sr}$  keletkezési és bomlási sémája a következő:



Megemlítem, hogy a  $^{90}\text{Sr}$  meghatározására gyakran a  $^{90}\text{Y}$  kemény  $\beta$ -sugárzása szolgál, amely pl. Cserenkov számlálóval is mérhető [17].

A  $^{131}\text{I}$  izotóp jelenti nukleáris robbantás esetén az első néhány héten át a legnagyobb veszélyt. Rövid felezési ideje miatt csak a korai kiszóródásban van jelen, s az ember szervezetébe friss tejjel, ivóvízzel vagy belélegezve kerülhet. A  $^{131}\text{I}$  jelenléte a közelmúltban lezajlott atomrobbantási kísérletre utal, így pl. 1973 augusztusában az USA számos államában észlelték a tej  $^{131}\text{I}$  kontaminációját, s ez az 1973. jún. 26-i kínai nukleáris kísérlettel volt összefüggésben [18].

Felezési idejét s koncentrációját tekintve a  $^{137}\text{Cs}$  a  $^{90}\text{Sr}$ -hoz hasonló radioaktív izotóp, s az emberi szervezetbe jutva főleg az izomzatban s a belső szervekben halmozódik fel. A  $^{137}\text{Cs}$  meghatározása általában  $\gamma$ -spektrometrián történik, leányeleme, a  $^{137}\text{Ba}$  ugyanis 2,6 perc felezési idejű  $\gamma$ -sugárzó izotóp.

A bioszférát az eddig felsoroltakon kívül számos egyéb mesterséges eredetű radioaktív izotóp (pl.  $^{54}\text{Mn}$ ,  $^{59}\text{Fe}$ ,  $^{60}\text{Co}$ ,  $^{65}\text{Zn}$ ,  $^{95}\text{Zr}$ ,  $^{103}\text{Ru}$ ,  $^{134}\text{Cs}$ ,  $^{140}\text{Ba}$ ,  $^{144}\text{Ce}$ ) szennyezi. Ezek azonban vagy rövid felezési idejű izotópok, vagy koncentrációjuk általában elhanyagolható a tartós sugárszennyezést okozó  $^{90}\text{Sr}$  és  $^{137}\text{Cs}$  izotópok koncentrációja mellett. A továbbiakban ezért elsősorban a  $^{90}\text{Sr}$  és a  $^{137}\text{Cs}$  útját követjük a biológiai láncfolyamat elemeiben, s az ezen két izotóp koncentrációját, felhalmozódását befolyásoló tényezőket vizsgáljuk.

### A bioszféra radioaktív szennyeződését befolyásoló tényezők

Egy adott területen a levegő—víz—talaj—növény—állat—ember biológiai lánc sugárszennyezettségét az előidéző forrásokon kívül számos egyéb tényező is befolyásolja. Így a kontamináció mértékét

1. a terület földrajzi elhelyezkedése,
2. az éghajlati, meteorológiai viszonyok,
3. a talaj mechanikai szerkezete és kémiai összetétele,
4. az alkalmazott agrotechnikai eljárások,



5. a növény fajtája és kora,
  6. az esetlegesen alkalmazott dekontaminációs eljárások,
  7. az állat fajtája és kora,
  8. az ember életkora és táplálkozási szokásai is befolyásolják.
- A továbbiakban ezen 8 tényező hatását elemzem.

### A terület földrajzi elhelyezkedése és a radioaktív kontamináció közötti összefüggés

A nukleáris kísérletekre visszavezethető s a csapadékkal és a gravitációs kiülepedéssel a földfelszínre jutó radioaktív izotópok mennyisége jelentősen függ a terület földrajzi elhelyezkedésétől. Az északi féltekén pl. a radioaktív kontamináció két-háromszorosa a déli féltekére jellemző értéknek, s a kontamináció maximuma a 30—60. földrajzi szélességi fok közé esik [19], [20], [21], [22]. Eltérés tapasztalható Európa és Amerika között is, így pl. Amerikában azonos szélességi fokon a kontamináció mintegy másfélszerese az Európában mérhető szintnek.

A radioaktív szennyezettség mértékére a felszíni módosulat is hatással van. Sík területen és hegyes, lejtős vidéken különbség mutatkozik a radioaktív anyagok talajon történő megkötődésében [23]. Domboldalakon termelt növények vizsgálata során pl. megállapították, hogy a növények talajból történő aktív izotópfelvétele lényegesen kisebb mérvű, mint ugyanazon terület sík részein. Ez a tény úgy magyarázható, hogy a csapadékkal a földfelszínre kerülő izotópok jelentős része még a talajon való megkötődés előtt lefolyik a felületről, s így a talajból a növényekbe kevesebb radioaktív anyag jut.

Egy terület radioaktív szennyezettségét döntően befolyásolhatják az atomerőművek emissziói s az esetleges reaktor-balesetek is. A Big Point-i atomerőmű körzetében pl. a víz s a vízi szerveszetek  $^{60}\text{Co}$ ,  $^{65}\text{Zn}$ ,  $^{134}\text{Cs}$ ,  $^{137}\text{Cs}$  aktivitása 3—10-szerese az atomerőmű üzembehelyezése előtt mért radioaktivitási értékeknek [24]. Hasonló mérési eredményekről számolt be *Kaye* [25] is az atomerőművekből a vízbe s a vízi szerveszetekbe jutó  $^{54}\text{Mn}$ ,  $^{58}\text{Co}$ ,  $^{131}\text{I}$ ,  $^{134}\text{Cs}$ ,  $^{137}\text{Cs}$  aktivitását illetően. Viszonylag nagy területen okozott radioaktív kontaminációt a windscalei reaktor-baleset is [15]. A mérések szerint  $1\ \mu\text{Ci}/\text{m}^2$  legelőre jutó  $^{131}\text{I}$  aktivitás esetén a tehéntejben mintegy  $0,1\ \mu\text{Ci}/\text{liter}$   $^{131}\text{I}$  aktivitás volt kimutatható.

Végezetül megemlítem — bár ez a mesterséges eredetű radioaktív kontaminációt nem, vagy csak nagyon áttételesen befolyásolja —, hogy egy adott területen élő szerveszetek sugárterhelését a talaj természetes eredetű radioaktivitása ( $^{238}\text{U}$ ,  $^{232}\text{Th}$ ,  $^{226}\text{Ra}$ ,  $^{40}\text{K}$  stb.) is befolyásolja, s ez pedig a geológiai viszonyok függvénye. Az indiai Kerala tartományban pl. a talajban jelentős mennyiségű tóriumtartalmú monazit fordul elő, s ennek következtében a természetes háttérsugárzás dózisentenzitása egy nagyságrenddel meghaladja a Föld felszínére jellemző átlagot. Hazánkban is találkoztunk hasonló példával, ugyanis a Velencei-hegység gránitos kőzete rádiumban nagyon dús. A különböző hazai talajminták  $\alpha$ -aktivitása pl.  $10\text{—}80\ \text{pCi}/\text{g}$  közötti érték, ugyanakkor a velencei gránit  $100\ \text{pCi}/\text{g}$  feletti [26].



### Az éghajlati, meteorológiai viszonyok s a radioaktív kontamináció közötti összefüggés

Ha a felszíni nukleáris robbantás energiája 200 kt TNT-nél nagyobb volt, a radioaktív hasadási termékek zöme már a sztratoszférába jut, ezért is nevezik a sztratoszférát a hasadó anyagok világméretű gyűjtőjének. A  $20\text{ }\mu$ -nál nagyobb részecskék a közvetlen közelben hullanak vissza, s így csak helyi szennyeződést okoznak. Az  $1\text{--}10\text{ }\mu$  nagyságú részecskék már csak több hónap múlva jutnak a földfelszínre, az  $1\text{ }\mu$ -nál kisebbek (ezekre már a Brown-mozgás jellemző) pedig évtizedekig is a sztratoszférában maradhatnak [27].

A sztratoszférából fokozatosan az atmoszféra alacsonyabb rétegeibe jutó radioaktív izotópok a földfelszínre 3 különböző úton juthatnak [28]:

1. csapadékmentes időben gravitációs ülepedéssel (fall-out)
2. a felhőkben végbemenő kieséssel (rain-out)
3. a felhők alatti kimosódással (wash-out).

A fall-out tehát az a folyamat, amikor a radioaktív részecskék a sztratoszférából a troposzférán keresztül száraz kihullással jutnak a földfelszínre. A rain-out és a wash-out pedig együttesen képezi a nedves kihullást, közülük azonban a rain-out a lényegesebb folyamat, mivel a csapadékvíz radioaktivitása elsősorban a felhős levegőben levő radioaktív részecskék hatására alakul ki [29].

A nedves kihullás által a talajra jutó radioaktív anyagok mennyisége az együttes kiszóródás  $80\text{--}90\%$ -a, így egy terület radioaktív szennyezettségét elsősorban a csapadékkal a földfelszínre s a növényzetre jutó aktív anyagok mennyisége határozza meg [30]. Simon [28] véleménye szerint felírható a következő formula:

$$y = c \cdot x, \text{ ahol:}$$

$y$  a földfelszín sugárszennyezettsége  $\text{nCi/m}^2$ -ben

$x$  a csapadék mennyisége  $\text{mm}$ -ben.

A  $c$  konstans dimenziója így  $\text{nCi/m}^2 \text{ mm}$ , abszolút értéke pedig a földrajzi hely függvénye. Természetesen ha a talaj fajlagos radioaktivitását az ugyancsak szokásos  $\text{nCi/kg}$ -ban adjuk meg, akkor a konstans számértéke és dimenziója is megváltozik.

Az  $y = c \cdot x$  összefüggés szerint elsőfokú függvénykapcsolat áll fenn a terület radioaktív kontaminációja s a csapadék mennyisége között. A Győr-Sopron megyében vett főzelék- és takarmánynövény, valamint tejmintákra vonatkozóan ezt az összefüggést igazoltuk [31], [32], [33], [34], [35]. A győri Élelmiszerellenőrző és Vegyvizsgáló Intézet Izotóp Laboratóriumában végzett mérések lényegesebb megállapításai az 1968—1973 közötti időszakra vonatkozóan a következők:

1. A Győrről mintázott főzeléknövények (sóska, spenót, saláta) és takarmányok radiostroncium szennyezettsége s a csapadék mennyisége között szignifikáns elsőfokú korreláció van, a korrelációs együttható értéke főzeléknövényekre  $0,78$ , takarmánynövényekre  $0,80$ .

2. A Mosonmagyaróváron vett tejminták radioaktivitása s a csapadék mennyisége között is fennáll az elsőfokú korreláció, a koefficiens értékét  $0,99$ -nek találtuk.

3. A győri és mosonmagyaróvári takarmányminták radioaktivitási értékeinek variancia analízise azt mutatta, hogy a kontaminációs szintre az év, évszak és a hely egyaránt szignifikáns hatással van.

A radioaktív szennyezettség és a csapadék mennyisége közötti összefüggést bizonyítják Török [36] mérései is. A magyarországi talajok  $^{90}\text{Sr}$  koncentrációját meg-



határozva megállapította, hogy a legszennyezettebb talajok a Dunántúlon, a közepes kontaminációjúak a Tiszántúlon, a legkisebb szennyezettségűek pedig a Duna—Tisza közén találhatók. Ez pedig elsősorban az eltérő csapadékmennyiségekkel hozható összefüggésbe.

A csapadékviszonyoknak a radioaktív kontaminációra való meghatározó szerepét hangsúlyozza *Gedeonov* [37] is. Közlése szerint a talaj  $^{137}\text{Cs}$  tartalma a következőképp számítható:

$$A = a + b \cdot h, \text{ ahol:}$$

$$a = 9 \text{ mCi/km}^2$$

$$b = (0,07 \pm 0,02) \text{ mCi/km}^2$$

$$h = \text{a csapadékmennyiség mm-ben}$$

Más szerzők is megemlítik a csapadék mennyiségének meghatározó szerepét. *Zier* [21] szerint pl. a magasabb hegységekben a több csapadék miatt a radioaktív kontamináció 2—4-szerese a síkságon mérhetőnek. Ugyancsak a csapadékviszonyok eltérőségével magyarázza *Vrigazov* [38] is a Bulgária északi és déli vidékeiről származó búza jelentősen eltérő  $^{90}\text{Sr}$  aktivitását.

Az általunk vizsgált növényi minták kontaminációjának évszakonkénti megoszlását vizsgálva azt tapasztaltuk, hogy a nyári hónapokban vett minták erősebben szennyezettek voltak. Ez azzal magyarázható, hogy a légkör radioaktív szennyezettségének évi maximumai a mi földrajzi szélességünkön általában májusra, júniusra várhatók [37] [39]. Ennek az az oka, hogy májusban a nyugat- és középeurópai területek felett nagyobb gyakorisággal jelennek meg a frontok, mint más hónapokban. A radioaktív szennyezettség növekedése *Kopcewicz* [40] szerint úgy jön létre, hogy a hideg-frontokkal együttjáró „tropopauza szakadások”-on az erősen szennyezett, hideg, alacsony sztratoszférából radioaktív aeroszol részecskék kerülnek be a viszonylag gyengén szennyezett troposzférába. Ezen radioaktív anyagok azután a hideg-frontokat megelőző leáramlással jutnak a felszín közelébe, majd onnan száraz vagy nedves kihullással a földfelszínre. A troposzférában levő radioaktív anyagok kimosódásának mértéke egyébként a csapadékmennyiség függvénye, a felhő alatti tér teljes kimosódása csak 5 mm-en felüli csapadékmennyiségtől következik be.

Megemlítem még, hogy a növények radioaktív kontaminációját a csapadékmennyiségen kívül kisebb mértékben egyéb meteorológiai tényezők (hőmérséklet, napsütéses órák száma) is befolyásolják. Ezen tényezők ugyanis hatással vannak a növény anyagcsere-folyamataira, ez pedig összefügg a radioaktív izotópok felvételével és akkumulációjával. Így pl. a növények kalcium anyagcseréjét — s a kalciummal együtt a  $^{90}\text{Sr}$  felvételét — a fény erőssége is befolyásolja, adott határok között ugyanis a megvilágítással egyenes arányban nő a szárazanyagra vonatkoztatott Ca tartalom [41].

#### A talaj mechanikai szerkezete és a radioaktív kontamináció közötti összefüggés

A talaj a hosszú felezési idejű hasadási termékek megkötődésében és felhalmozásában jelentős szerepet játszik. A talajnak főleg közvetítő szerepe van, azaz megköti a levegőből, esővízből vagy felszíni vizekkel a talaj felszínére jutó hasadási termékeket, majd a benne élő szervezeteknek átadva bekapcsolja ezen radioaktív anyagokat az



elemek biológiai körforgásába. A továbbiakban külön elemzem a talaj és a növényzet kontaminációjának kapcsolatát a radioaktív stroncium és cézium izotópok esetében.

A radioaktív stroncium talajban való megkötődésében az agyagásványok mennyisége a döntő [42]. Nagyobb agyagtartalomnál a  $^{89}\text{Sr}$  és  $^{90}\text{Sr}$  jobban megkötődik, mozgása lassabb, s az esővíz hatására csak kis mértékben mosódik ki és kerül mélyebb rétegekbe. Homokos talajon viszont a stroncium megkötődése kisebb, mozgékony-sága nagyobb, így kedvező vízgazdálkodási viszonyok között fokozatosan az alsóbb rétegekbe kerül, s így bizonyos idő után a növények számára már nem felvehető. Jelentős tényező a talaj diszperzitása is, ez összefügg a humusztartalommal, ami viszont befolyásolja a növények Ca és Mg felvételét. A finomdiszperz talajoknak általában magasabb a humusztartalma.

A  $^{90}\text{Sr}$  és  $^{89}\text{Sr}$  adszorpciójára hatással vannak a talaj iszapfrakciói is. A montmorillonit agyagásványok erősen adszorbeálnak, míg a csillámok, a vas- és alumíniumhidroxidok, a kaolinit kevésbé kötik meg a  $^{90}\text{Sr}$ -ot és  $^{89}\text{Sr}$ -ot [43].

Szikes talajok esetében a mechanikai összetétel a sajátos vízforgalom és kémiai tulajdonságok következtében kevésbé játszik szerepet a hasadási termékek megkötődésében. Általában azonban a talajokra az jellemző, hogy mechanikai szerkezetük jelentősen befolyásolja a talaj vízforgalmát, ez pedig szorosan összefügg a radioaktív stroncium izotópok talajban történő mozgásával, kilúgozásával, mivel a kilúgozódás, kimosódás sebességét elsősorban a talajok vízháztartása szabja meg [44]. Kötött talajokon ez a folyamat lassú, ugyanis a lefelé irányuló vízmozgás lassúsága miatt a radioaktív anyagok kimosódása kisebb mérvű.

1971–1972-ben Magyarországon széleskörű felmérésre került sor a talajok radioaktív szennyezettségét illetően [36], [45]. A fontosabb magyarországi talajok átl.  $^{90}\text{Sr}$  szennyezettségi adatait a 3. táblázatban foglalom össze. A táblázatból megállapítható, hogy a homokos talaj kevésbé szennyezett, mint a vályogtalaj.

### 3. TÁBLÁZAT

Magyarországi talajtípusok átlagos  $^{90}\text{Sr}$   
kontaminációja 1971–1972-ben

Talajtípus	$^{90}\text{Sr}$ kontamináció pCi/kg talaj
Homoktalaj	130
Réti öntéstalaj	154
Erdőtalaj	173
Rétitalaj	175
Csernozjom	209
Szolonyec	242

A 4. táblázat a  $^{90}\text{Sr}$  függőleges eloszlását mutatja a talaj szerkezetétől függően [46]. A táblázatos adatok a felületre vitt s az adott vastagságú talajszelvényben megkötött izotóp mennyiségének arányát mutatják %-ban.

A  $^{137}\text{Cs}$  kevésbé szívódik fel a talajból a növényekbe, mint a  $^{90}\text{Sr}$ , ami elsősorban a szivacsos struktúrájú agyagásványokhoz való jobb kötődésével magyarázható [47]. A talajból a növényekbe jutó  $^{137}\text{Cs}$  mennyisége szignifikáns korrelációban van a talaj szerves anyag tartalmával [48]. Olyan talajokon, amelyek felső rétege sok szerves anyagot tartalmaz, a cézium felszívódása nagyobb mérvű, ugyanis a szerves anyagok



## 4. TÁBLÁZAT

A  $^{90}\text{Sr}$  behatolási mélysége különböző talajtípusok esetén

Mélység cm	Agyagtalaj pH = 4,6	Homoktalaj pH = 6,6	Meszes márga talaj pH = 7,6
0,0—2,5	50	63	37
2,5—5,0	20	22	24
5,0—7,5	15	13	19
7,5—10,0	10	2	16
10,0—12,5	5	0	3
12,5—15,0	0	0	1

gátolják az agyagásványokhoz való kötődést. A megfigyelések szerint a vulkanikus eredetű talajokon termesztett növények  $^{137}\text{Cs}$  tartalma is magasabb, mint a nem vulkanikus talajon termesztetteké [49]. Jól kimutatható az összefüggés a talaj mechanikai frakcióinak szemcsemérete és a talajból a növényekbe jutó  $^{137}\text{Cs}$  mennyisége között is. A  $^{137}\text{Cs}$  különböző talajokba való behatolási mélységét az 5. táblázatban ismertetem [46].

## 5. TÁBLÁZAT

A  $^{137}\text{Cs}$  behatolási mélysége különböző talajtípusok esetén

Mélység cm	Agyagtalaj pH = 4,6	Homoktalaj pH = 6,6	Meszes márga talaj pH = 7,6
0,0—2,5	98	98	43
2,5—5,0	2	2	21
5,0—7,5	0	0	15
7,5—10,0	0	0	16
10,0—12,5	0	0	4
12,5—15,0	0	0	1

A 4. és az 5. táblázat adatait összehasonlítva megállapítható, hogy a  $^{137}\text{Cs}$  nem hatol be olyan mélyen a talajba mint a  $^{90}\text{Sr}$ , s a talaj típusától függetlenül 5 cm-nél mélyebbre csak elenyésző mennyiség jut. Ezt a felismerést támasztják alá Gedeonov [37] mérései is, ezek szerint a talaj felszínére jutó  $^{137}\text{Cs}$  mennyiségének döntő többsége a legfelső 1 cm-es talajrétegben található.

### A talaj kémiai összetétele s a radioaktív kontamináció közötti összefüggés

A növények radioaktív stroncium izotópokkal való szennyeződésének mértékét a talaj kémiai összetevői közül a kalcium tartalom döntően befolyásolja. Ennek oka az, hogy a stroncium kémiaileg hasonló viselkedésű a kalciumhoz, így a kalcium a  $^{90}\text{Sr}$  inaktív hordozójának tekinthető.

A talajból a növényekbe felszívódó, és a táplálékba, majd az emberi szervezetbe kerülő radioaktív anyagok koncentrációja a kiindulási koncentrációhoz képest változik. A különböző anyagcsere folyamatoknál ún. diszkriminációs faktorok álla-



píthatók meg, amelyek megmutatják, hogy az előző lépcsőből a radioaktív szennyeződésnek milyen hányada ment tovább a biológiai láncfolyamat következő elemébe. A talajból a növényekbe jutó radioaktív anyag mennyiségét mindig egy inaktív hordozó-anyaghoz viszonyítják,  $^{90}\text{Sr}$  esetében pl. a kalciumhoz. Mivel  $^{90}\text{Sr}$ -ra vonatkozóan a növény/talaj diszkriminációs faktor:

$$D = \frac{{}^{90}\text{Sr}/\text{Ca a növényben}}{{}^{90}\text{Sr}/\text{Ca a talajban}} \approx 1,$$

látható, hogy a talaj Ca tartalma a növények  $^{90}\text{Sr}$  tartalmát döntően meghatározó tényező.

Megemlítem, hogy a talajból a növényekbe felszívódó  $^{90}\text{Sr}$  mennyiségét kisebb mértékben a talaj pH-ja, valamint az oldható sók mennyisége és kémiai összetétele is befolyásolja. A növények számára elsősorban a közel semleges pH-jú (pH=6—8) talajokban levő  $^{90}\text{Sr}$  jól hozzáférhető, ugyanis a neutrális sók kationjainak hatására a stroncium viszonylag könnyen deszorbeálódik a talajról, s így a növények számára könnyen felvehetővé válik.

A radioaktív stroncium talajból a növényzetbe jutó mennyisége természetesen összefügg a talajok inaktív stroncium tartalmával is. A különböző talajok Sr koncentrációja 0,1—2,8 g Sr/kg talaj [50]. Így pl. mivel a tözegtalajok Sr tartalma nagyobb, ezért az ilyen talajból a növények által felvett  $^{90}\text{Sr}$  mennyisége kisebb, mint az ásványi talajok esetében [51].

A  $^{137}\text{Cs}$  talajból való felvétele a növények számára sokkal kisebb mérvű, mint a  $^{90}\text{Sr}$  felvétele. Miután a cézium kémiaiilag a káliumhoz hasonló, így a diszkriminációs faktor számításánál a kálium tartalmat vesszük alapul. Mivel a diszkriminációs faktor

$$D = \frac{{}^{137}\text{Cs}/\text{K a növényben}}{{}^{137}\text{Cs}/\text{K a talajban}} \approx 0,01,$$

így látható, hogy a talajból a növényekbe jutó radiocézium mennyisége nagyságrendileg kisebb, mint a  $^{90}\text{Sr}$  mennyisége. A talaj K tartalmán kívül befolyásolja a növények  $^{137}\text{Cs}$  felvételét a talaj nedvességtartalma, ioncserélő képessége s pH-ja is [52], [53]. A cézium egyébként a litoszférában átlagosan 3,2 ppm koncentrációban fordul elő, s a talajok Cs tartalma 1—10 mg Cs/kg talaj [54].

A győri Élelmiszerellenőrző és Vegyvizsgáló Intézet Izotóp Laboratóriumában s az ELTE Növényélettan tanszékén számos olyan kísérletet végeztünk, amelyekben a talaj kémiai összetételének hatását vizsgáltuk különböző növények stroncium és cézium felvételére [55], [56]. A kísérleti eredményekből levonható fontosabb következtetések a következők:

1. A növények talajból történő  $^{90}\text{Sr}$  felvételére a talaj Ca tartalmának szignifikáns hatása van, a talaj Ca tartalmának növelése csökkenti a növényekbe jutó  $^{90}\text{Sr}$  mennyiségét.

2. A talaj K tartalmának növelésével csökkenthető a növények által a talajból felvett  $^{137}\text{Cs}$  mennyisége is, bár a csökkenés kisebb mérvű, mint a  $^{90}\text{Sr}$ —Ca esetében.

3. A  $^{90}\text{Sr}$  és  $^{137}\text{Cs}$  felvételére hat a talaj Na tartalma is, de a hatás kisebb mérvű, mint a Ca, ill. K esetében.

4. A különböző növények (sóska, spenót, saláta, lucerna, bab, búza, kukorica) Sr tartalma 27—82 mg/100 g szárazanyag, Cs tartalma 5—13 mg/100 g szárazanyag érték.



Megemlítem, hogy a szántóföldi talajokra jellemző  $^{137}\text{Cs}/^{90}\text{Sr}$  arány viszonylag konstans érték — *Csupka* [57] szerint 1,5, *Török* [58] szerint 1,6 — így a talaj radioaktív szennyezettsége az egyik izotóp mérésével is megfelelő pontossággal állapítható meg. A diszkriminációs faktorok ismeretében pedig a biológiai lánc további elemeibe jutó aktív anyagok mennyisége is becsülhető.

### Az alkalmazható agrotechnikai eljárások hatása a radioaktív szennyezettségre

A radioaktív szennyeződés felhalmozódását jelentősen befolyásolja az illető terület művelési módja. Így pl. a mezőgazdaságilag rendszeresen művelt területeken a  $^{90}\text{Sr}$  viszonylag egyenletesen oszlik el a talaj felső 20–30 cm-es rétegében, s csak fokozatosan hatol lejjebb az alsóbb rétegekbe. Ugyanakkor a legelőkön s a mezőgazdaságilag nem művelt területeken a radioaktív anyagok jelentős része a talaj felső 5 cm-es rétegében marad.

Különböző agrotechnikai eljárásokkal a talajból a növényekbe jutó aktív anyagok mennyisége csökkenthető. Így pl. meszezéssel, tehát a talaj Ca tartalmának növelésével — azaz a  $\text{Sr}/\text{Ca}$  arány csökkentésével — jelentősen csökkenthető a növények  $^{90}\text{Sr}$  felvétele. A hatás azonban bizonyos idő után csökken, ami a hatóanyagnak a talajból történő kimosódásával magyarázható [59].

A talaj kálium és nátrium tartalmának növelésével pedig a  $^{137}\text{Cs}$  felszívódása mérsékelhető. Ennek azonban különösebb jelentősége nincs, ugyanis a növények a  $^{137}\text{Cs}$  tartalmuk nagy részét — esetleg 95 %-át is — nem a talajból, hanem közvetlenül a levélzeten át, direkt úton veszik fel [60]. Ugyanígy felveheti a növény a radioaktív stronciumot is a levélzeten át, azonban a  $^{90}\text{Sr}$  elsősorban a talajból jut a növényekbe. A levél- és gyökérsejtek ionfelvétele egyébként teljesen azonos mechanizmusú folyamat, amelyre azonos kinetikus konstansok és ionszelektivitás jellemző [61].

A növények talajból történő radioaktív anyag felvételét a felhasznált műtrágyák fajtája is befolyásolja [62]. A nitrogénműtrágyák a radiocézium felvételét befolyásolják, pl. az ammónium ( $\text{NH}_4^+$ ) ionok elősegítik a  $^{137}\text{Cs}$  talajból a növénybe jutását, ugyanakkor a nitrát ( $\text{NO}_3^-$ ) ionok nem fejtenek ki ilyen hatást.

A foszfát műtrágya a  $^{90}\text{Sr}$  akkumulációjára hat, mivel a stroncium a foszfáttal vízben nagyon rosszul oldódó stronciumfoszfátot képez, s így a növényekbe kevés aktív stroncium jut. A növények  $^{90}\text{Sr}$  felvétele a talaj pH értékének változtatásával is csökkenthető, ugyanis a talaj lúgosságának növelésével a radiostroncium nagy része  $\text{SrCO}_3$  formájában kicsapódik [63].

Egyes esetekben vizes elárasztással elérhető, hogy a radioaktív anyag a mélyebb talajrétegekbe mosódjon. Ennek főleg akkor lehet jelentősége, ha a talaj laza szerkezetű, s mezőgazdaságilag fontos terület szennyeződik (ezt esetleg reaktor-baleset is előidézheti), és a talajt a talajtani adottságoktól függően dekontaminálni kell.



**A növény fajtája és kora,  
valamint a radioaktív szennyezettség közötti összefüggés**

Az előbbiek során rámutattam arra, hogy a növény/talaj diszkriminációs faktor a  $^{90}\text{Sr}$  esetében  $\approx 1$ , így a növényekben a talajhoz hasonló  $^{90}\text{Sr}/\text{Ca}$  arány várható. Néhány növényre vonatkozóan a  $^{90}\text{Sr}$  és  $^{137}\text{Cs}$  felhalmozást mutató diszkriminációs faktorok a 6. táblázatban láthatók [50].

6. TÁBLÁZAT

A különböző növényekre jellemző  
diszkriminációs faktorok értékei

A növény fajtája	Növény/talaj diszkriminációs faktor	
	$^{90}\text{Sr}$	$^{137}\text{Cs}$
Búza	0,6—1,6	0,004—0,02
Borsó	0,6—1,2	0,001—0,02
Zab	0,6—1,0	0,001—0,04
Lóhere	0,3—0,9	0,004—0,008
Répa	0,4—2,2	0,007—0,04

Miután  $^{90}\text{Sr}$  esetében a vonatkoztatás a Ca tartalomhoz történik, így természetes, hogy szárazanyagra vonatkozóan az azonos termesztési körülmények közötti s közelítőleg azonos diszkrimináló képességgel rendelkező növények  $^{90}\text{Sr}$  szennyezettsége jelentősen eltérő lehet. A paraj és a saláta  $^{90}\text{Sr}$  aktivitását összehasonlítva pl. megállapítható, hogy a paraj szárazanyagra vonatkozóan nagyobb radioaktivitást mutat [64]. Ha viszont a  $^{90}\text{Sr}$  aktivitást a növényben levő Ca tartalomra vonatkoztatjuk, akkor kiderül, hogy a két érték közel azonos, mivel a paraj Ca tartalma szignifikánsan nagyobb, mint a salátáé. Lényegében ugyanezzel magyarázható az is, hogy szárazanyagtartalomra vonatkozóan a hüvelyesek 3—7-szer több radiostronciumot akumulálnak, mint a kalászosok [15]. A különféle növények  $^{90}\text{Sr}$  felvétele a következő sorrendben csökken [50]: borsó, lóhere, répa, burgonya, zab, búza, len. A gabonák közül egyébként a legkevesebb  $^{90}\text{Sr}$ -ot a rizs tartalmazza [65], [66].

A  $^{137}\text{Cs}$  talajból történő felvétele esetén — mint már említettem — a növények nagyon jól diszkriminálnak s így a gyökérzetten át a talajból csak elenyésző mennyiségű  $^{137}\text{Cs}$  jut a növényekbe. Szárazanyagra vonatkozóan egyébként a különböző növények talajból történő  $^{137}\text{Cs}$  felvétele a következő sorrendben nő [67]: búza, árpa, borsó, köles, zab, cukorrépa, bab. Érdekes megfigyelés, hogy a sarkvidéken a növényi, s ebből adódóan az állati (rénszarvas) és emberi szervezetekben található  $^{137}\text{Cs}$  koncentráció többszöröse a mérsékelt égöv alatt mérhető értékeknek [68]. Ez valószínűleg arra vezethető vissza, hogy a zuzmók és más sarkvidéki vegetációk a  $^{137}\text{Cs}$ -ot fokozottabban dúsítják.

Egyes növények sugárszennyezettségére utaló adatokat a 7. táblázat tartalmaz [69]. A táblázatos adatok az 1975. évi magyarországi mérések átlagai.

Látható, hogy a mesterséges sugárszennyezettségre utaló fémionfrakció aktivitások nagyságrendileg kisebb értéket képviselnek, mint a káliumban 0,0119 %-os gyakorisággal előforduló  $^{40}\text{K}$  izotóp aktivitásából adódó természetes aktivitáshányad. Megemlítem azonban, hogy 1961—1964 között, amikor a kontamináció maximuma



## 7. TÁBLÁZAT

A magyarországi Élelmiszerellenőrző és Vegyvizsgáló Intézetek Izotóp laboratóriumaiban végzett 1975. évi mérések átlagos értékei

Növény		Aktivitás pCi/g szárazanyag			Fémionfrakció
		Összes	<sup>40</sup> K	fémionfrakció	pCi/g Ca
Paraj	tavaszi	63,8	57,1	2,6	176
	őszi	59,1	54,5	2,3	155
Saláta	tavaszi	47,6	37,3	2,0	170
	őszi	58,8	53,5	2,3	174
Sóska	tavaszi	39,7	37,3	1,6	168
	őszi	45,2	41,4	2,0	189
Gyomnövények		35,5	26,2	3,2	163
Dohány		30,9	23,8	4,8	122
Takarmánynövény		20,2	16,4	2,6	226

volt, a radiostroncium szennyezettséget jellemző fémionfrakció aktivitás azonos nagyságrendű volt a természetes eredetű aktivitással. 1961 őszén pl. a saláta átlagos fémionfrakció aktivitása 55,9, 1963 tavaszán a paraj átlagos fémionfrakció aktivitása 42,6 pCi/g szárazanyag volt [70].

A radioaktív szennyezettség eloszlása a növények különböző szervei között nem egyenletes. A növények Sr és Ca arányát összehasonlítva pl. megállapítható, hogy a vegetatív részekből a generatív (reproduktív) szervek felé történő iontranszport során a Sr:Ca arány csökken [71]. A búza leveleinek <sup>90</sup>Sr tartalma pl. csaknem tízszerese a szemekben mérhető értéknek [50]. Hasonló okok miatt pl. a szálstakarmányok radioaktív szennyezettsége is lényegesen meghaladja a szemestakarmányokét, hisz a <sup>90</sup>Sr elsősorban a vegetatív szervekben halmozódik fel.

A növények kontaminációját jelentősen befolyásolja az is, hogy a növényt a fejlődés (érés) melyik szakaszában érte a jelentősebb sugárfertőzés [72]. A fiatal növények ugyanis 2—3-szor többet akumulálnak (szárazanyagra vonatkozóan) mint az érettebbek. Fiatal növényeknél a levélzeten át történő izotópfelvétel is gyorsabb. A fiatal búza és napraforgó levelek pl. a rápermetezett <sup>137</sup>Cs izotópot 2—4-szer gyorsabban veszik fel, mint az idősebb növények levelei [73]. A radioaktív anyagok felvétele egyébként — függetlenül attól, hogy a levélzeten vagy a gyökerek által történt a felvétel — a vegetációs periódus végéig tart, s így általában a kontamináció az érett növényeken éri el a maximális értéket.

A növényi szervezetek radioaktív szennyezettségének vizsgálatával kapcsolatban számos kísérletet végeztünk [74], [75], [76], [77], a fontosabb megállapítások a következőképp összegezhetők:

1. A <sup>90</sup>Sr esetében a növény/talaj diszkriminációs faktor értékét a talaj típusától függően a különböző növényekre (sóska, spenót, saláta, lucerna, bab, búza, kukorica) vonatkozóan 0,25—1,49 közötti értéknek találtuk.

2. A növények által a talajból felvett <sup>90</sup>Sr-nak több mint 80 %-a a növény föld feletti részeibe jut, <sup>137</sup>Cs esetében viszont mintegy 60 % a gyökérzetben marad. Ez



utóbbi részben a cézium káliumhoz viszonyított nagy atomsúlyával, s ezáltal kicsi diffúziósebességével magyarázható.

3. A gabonafélék radioaktív szennyezettségének vizsgálata során megállapítottuk, hogy a rozs kontaminációja jelentékenyen meghaladja a búza és a rizs esetében mérhető szinteket.

4. Gyümölcsfalevelek vizsgálata során azt tapasztaltuk, hogy ezek szennyezettsége kb. azonos szintű a főzeléknövényekével.

Végezetül megemlítem, hogy 1971–1974 között a győri intézetben széleskörű felmérést végeztünk az Országos Mérő és Adatszolgáltató Hálózat programjában nem szereplő, de a népelelmezésben fontos szerepet játszó egyes növényi eredetű élelmiszerek radioaktív szennyezettségének felmérésére. Mérési adatainkat a 8. táblázatban foglalom össze, a mintavétel helye Győr-Sopron megye volt.

8. TÁBLÁZAT

Növényi eredetű élelmiszerek radioaktivitása

Növényi élelmiszer	Aktivitás pCi/g szárazanyag			Fémionfrakció
	összes	<sup>40</sup> K	fémionfrakció	pCi/g Ca
Alma	7,2	6,2	0,7	778
Körte	7,0	6,1	0,5	538
Eper	16,9	13,9	1,3	425
Szőlő	12,1	11,8	0,1	45
Málna	9,4	7,8	0,3	182
Szürke tölcsérgomba	41,3	35,7	3,5	843
Üborka	2,1	1,9	0,1	150
Paprika	27,1	24,2	2,2	989
Sárgarépa	16,4	11,1	0,7	90
Káposzta	22,1	21,4	0,5	55
Borsó	7,5	5,8	0,3	207

### Dekontaminációs eljárások

A növények, s ebből adódóan az állati szervezetek sugárszennyezettségének csökkentése lényegében két úton érhető el. Egyrészt preventív módszerek alkalmazásával, tehát a talajból a növényzetbe jutó aktív izotópok mennyiségének csökkentésével (a már említett agrotechnikai eljárások alkalmazásával), másrészt a fogyasztási célokat szolgáló növényi és állati eredetű mezőgazdasági termékek, takarmányok, élelmiszerek dekontaminációjával.

Növényi részek esetében, ha a sugárszennyezettség nagy része porszennyeződésből ered, a dekontamináció jó hatásfokkal végezhető el egyszerű vizes mosással [72]. Zöldségek és főzeléknövények esetében a dekontaminálás hatásfoka jelentékenyen fokozható, ha a mosóvíz szerves savakat (citromsav, borkősav) is tartalmaz [78]. A cézium egyébként könnyebben eltávolítható, mint a stroncium, <sup>137</sup>Cs szennyezés esetén 90–95 %, <sup>90</sup>Sr szennyezés esetén 60–75 % a dekontamináció maximális hatásfoka [79]. Megemlítem, hogy a gabonafélék is jól dekontaminálhatók mosással, ha a mosóvíz foszforsavat vagy polifoszfátokat tartalmaz [80].

A gyökérzet által felvett, s a növények leveleiből vízzel kimosható elemek a k-lúgozódás mértéke alapján három csoportba sorolhatók [81]:



1. könnyen kimoshatók (10 % felett): Na, Mn, Cs
2. közepesen kimoshatók (1–10 %): Ca, Mg, Sr, K, S
3. nehezen kimoshatók (1 % alatt): Fe, Zn, P, Cl.

A kimosódás mértéke egyébként növényenként némileg változó, s az idősebb levelekből általában nagyobb mérvű, mint a fiatal levelek esetén.

A gabonáknál jellegzetes dekontaminációs eljárásnak tekinthető a kiörlés is, ugyanis mivel a radioaktív anyagok főleg a korpában halmozódnak fel, így a liszt aktivitása a kiörlési fok függvénye [82]. Jól alátámasztják ezt a megállapítást a 9. táblázatban látható adatok is, amelyek az 1971. évi magyarországi mérések átlagos értékeit reprezentálják [83].

#### 9. TÁBLÁZAT

1971-ben végzett gabonavizsgálatok eredménye

minta	Aktivitás pCi/100 g szárazanyag		
	összes	<sup>40</sup> K	fémionfrakció
Búza	390	330	20
Búzaliszt BL 55	123	103	3
Búzaliszt BL 80	170	143	4
Búzaliszt BL 112	360	343	7
Búzakorpa	1123	983	36

A sugárszennyezettség-csökkentésre a növényi eredetű élelmiszerekhez hasonlóan az állati eredetű termékek esetén is vannak különböző módszerek, melyek alkalmazásával mérsékelhető a táplálékláncon keresztül az emberi szervezetbe jutó aktív anyagok mennyisége. Húsipari termékeknel pl. a fall-out-ból eredő porszennyezettség megfelelő védőcsomagolással (polimer anyagok, paraffinozott papír, karton, alumíniumfólia stb.) küszöbölhető ki. Ha a hús felületére is jutott aktív szennyeződés, úgy a felületi réteget el kell távolítani. Ha a szennyeződést elsősorban rövid felezési idejű izotópok (<sup>89</sup>Sr, <sup>131</sup>I, <sup>140</sup>Ba stb.) okozzák, akkor a dekontaminálás megfelelő ideig tartó tárolással is elérhető.

Jól dekontaminálható a tej is, ioncserélő gyantán átbocsátva pl. a radiostroncium mennyisége az eredeti érték 2–4 %-ára csökken [84]. A tejet különféle tejtermékeké dolgozva is csökken a kontamináció, a túróba pl. a tej teljes <sup>90</sup>Sr aktivitásának mindössze 2–3 %-a, a sajtba 2–2 %-a jut [85]. A tejfől <sup>137</sup>Cs kontaminációja pedig csak 25-öd része a tejének.

A radioaktív szennyezettség jelenlegi foka nem teszi szükségessé a dekontaminációs eljárások alkalmazását, így ezekre nem is kerül sor. Megemlíthető azonban, hogy az élelmiszerelőállítás különböző technológiai folyamatai (mosás, főzés, fagyasztás stb.) során is csökken a radioaktív szennyezettség mértéke [86].

#### Az állat fajtája és kora, valamint a radioaktív kontamináció közötti összefüggés

A 10. táblázatban összefoglalom a tej és egyes állati szövetek radioaktív szennyezettségének meghatározására irányuló 1974. és 1975. évi hazai mérések átlagait [69], [87]. Tejnél az aktivitás 100 g tejre, csontnál g eredeti csontra, húsnál g szárazanyagra vonatkozik, ill. fémionfrakciónál az aktivitást pCi/g Ca-ban is megadom.



## 10. TÁBLÁZAT

A tej és egyes állati szövetek átlagos radioaktivitása Magyarországon  
1974-ben és 1975-ben

Minta	Év	Aktivitás pCi			Fémionfrakció
		összes	<sup>40</sup> K	fémionfrakció	pCi/g Ca
Tej	1974	136,5	122,5	2,6	14,5
	1975	129,9	118,2	2,0	15,9
Növendékmарha csont	1974	3,1	—	2,2	14,6
	1975	4,9	—	2,5	16,8
Juhcsont	1974	7,4	—	6,5	40,2
	1975	4,8	—	2,5	27,5
Halhús	1974	33,3	31,3	1,0	48,3
	1975	11,3	9,8	0,2	45,0
Halcsont	1974	8,7	—	5,1	17,6
	1975	7,3	—	4,6	32,7

Ha a 10. táblázat adatait összehasonlítjuk a 7., 8. és 9. táblázatban közölt értékekkel, akkor azonnal szembeötlő, hogy az állati testszövetek radiostroncium szennyezettsége jóval kisebb, mint a növények esetében mérhető érték. A szarvasmarha szervezetének <sup>90</sup>Sr-ra vonatkozó diszkrimináló képességét pl. a tej/takarmány diszkriminációs faktor mutatja:

$$D = \frac{{}^{90}\text{Sr}/\text{Ca a tejben}}{{}^{90}\text{Sr}/\text{Ca a takarmányban}},$$

melynek értéke Kovács [69] szerint  $\approx 0,1$ . Így az állatok által fogyasztott takarmány radioaktív szennyezettségének ismeretében a tej kontaminációja megbecsülhető. Csupka [88] szerint az összefüggés a következő:

$$C = p_r F_r + p_d F_d, \text{ ahol:}$$

$C$  a tej átlagos <sup>90</sup>Sr aktivitása (pCi/g Ca)

$F_r$  az átlagos <sup>90</sup>Sr fall-out aktivitás (nCi/m<sup>2</sup> év)

$F_d$  a takarmánynövény átlagos <sup>90</sup>Sr aktivitása (pCi/g Ca)

$p_r$  és  $p_d$  konstansok.

1969-re vonatkozóan pl. Nagybritanniában a  $p_r$  értékét 0,70-nek, a  $p_d$  értékét 0,11-nek találták.

A különböző korú és fajtájú állatok testszöveteinek <sup>90</sup>Sr szennyezettsége különböző mérvű. Így pl. a juhcsont sugárszennyezettsége felülmúlja a marhacsontét, ami részben az eltérő legeltetési, takarmányozási viszonyokkal, részben a különböző mérvű diszkrimináló képességgel magyarázható. Eltérő a fiatal s idősebb állatok csontjaiban inkorporálódó aktív anyagok mennyisége is, így pl. a borjúcsont kisebb radioaktivitást mutat mint a növendékmарhacsont [89]. Viszonylag jelentős lehet a különbség egy állat különböző szervei között is, pl. a pajzsmirigy, a nyirokcsomók, a máj és a vese a többi szervnél és izomszövetnél jobban szennyeződik [90].

Az állati szervezetek jó diszkrimináló képességéről eddig elmondottak azonban csak a radiostronciumra érvényesek. Radiocézium szennyezés esetén fordított jelenség játszódik le, ugyanis a különböző állati szervezetek a <sup>137</sup>Cs-ot dúsítják, tehát pl. a tejben mérhető <sup>137</sup>Cs/K arány nagyobb, mint a takarmányban. Éppen ezért az állati eredetű élelmiszerek mesterséges eredetű radioaktivitásának nagy része a <sup>137</sup>Cs tar-



talomra vezethető vissza. Megemlítem, hogy a diszkriminációs faktor 1-től különböző értéke egyúttal a sejtmembránokon keresztül történő aktív iontranszport bizonyítéka is [91].

A győri intézetben számos kísérletet végeztünk az állati szervezetek sugárszenyezettségének vizsgálata céljából [92], [93], [94], [95], [96], [97], [98]. Megállapításaink a következőképp foglalhatók össze:

1. A különböző állatok csontjainak  $^{90}\text{Sr}$  szennyezettsége lényegesen eltérő. Vizsgálataink szerint a legkevésbé szennyezett a baromfi- és sertécsont, közepes kontaminációjú a marhacsont, míg a legmagasabb kontaminációs szint a juhcsontban s a halcsontban mérhető. Azt is megállapítottuk, hogy a tavi halak (Fertő-tó) sugárszenyezettsége lényegesen felülmúlta a folyami (Duna, Rába) halak szöveteiben inkorporálódó aktív anyagok mennyiségét.

2. A vadon élő állatok (fácán, őz) csontjainak radiostroncium szennyezettsége nem különbözik szignifikánsan a háziállatok csontjainak radioaktivitásától.

3. Az 1968—1975 között Mosonmagyaróváron vett 83—83 összetartozó tej- és takarmányminta radioaktivitási értékeinek számítógépes feldolgozása szerint a tej és takarmány  $^{90}\text{Sr}$  szennyezettsége között az alábbi összefüggések állnak fenn:

$$y = 0,984x, \text{ ahol:}$$

$y$  a tej  $^{90}\text{Sr}$  szennyezettsége (pCi/100 g tej)

$x$  a takarmány  $^{90}\text{Sr}$  szennyezettsége (pCi/g szárazanyag)

ill.

$$y = 0,117x, \text{ ahol:}$$

$y$  a tej  $^{90}\text{Sr}$  aktivitása (pCi/g Ca)

$x$  a takarmány  $^{90}\text{Sr}$  aktivitása (pCi/g Ca).

4. Az állati szervezetek  $^{90}\text{Sr}$  koncentrációt csökkentő és a  $^{137}\text{Cs}$  tartalmat dúsító diszkrimináló képességét bizonyító mérési eredményeinket jól alátámasztották a lángfotometriásan végzett cézium és stroncium meghatározások is. A vizsgálatok szerint az állati testszövetekben a Sr:Ca arány kisebb, a Cs:K arány viszont nagyobb, mint a különböző növények esetében.

Megemlítem, hogy 1971—1974 között a növényi eredetű élelmiszerekhez hasonlóan széleskörű felmérést végeztünk az állati eredetű élelmiszerek radioaktív szennyezettségének meghatározására is. Mérési adataink a 11. táblázatban láthatók.

## 11. TÁBLÁZAT

Állati eredetű élelmiszerek radioaktivitása Győr-Sopron megyében

Minta	Aktivitás pCi/g szárazanyag		
	összes	$^{40}\text{K}$	fémionfrakció
Sertésmájkrém	3,0	2,6	0,2
Vadász felvágott	4,7	4,4	0,2
Disznósajt	2,2	1,8	0,3
Nyers sonka	4,6	4,5	0,0
Főtt sertéscomb	10,4	10,0	0,1
Párisi	5,5	5,3	0,1
Baromfimell	10,1	9,5	0,2
Baromficomb	10,8	10,3	0,1
Tojásfehérje	11,3	9,0	1,3
Tojássárgája	2,4	1,2	0,9



### Az életkor és a táplálkozási szokások hatása az emberi szervezetben inkorporálódó radioaktív anyagok mennyiségére

Az emberi szervezetben inkorporálódó radioaktív anyagok nagy része élelmiszereink útján jut szervezetünkbe. A béltraktusból felszívódó  $^{90}\text{Sr}$  elsősorban a csontozatban halmozódik fel, az izomzatba s a belső szervekbe kevesebb jut. A csontszövetek sugárterhelésének mintegy 65 %-a a  $^{90}\text{Sr}$  tartalom következménye [88]. Pontosan ellentétes a  $^{137}\text{Cs}$  szervezeten belüli megoszlása, ennek nagy része az izomzatban inkorporálódik.

A felszívódás és felhalmozódás fokát nagyon szignifikánsan befolyásolja az életkor. Csecsemőknél és kisgyermekeknél a  $^{90}\text{Sr}$  beépülése és kicserélődése viszonylag gyors, a biológiai felezési idő 1 évnél kisebb. Ugyanakkor felnőtt korban a kicserélődés üteme lelassul, a biológiai felezési idő elérheti az 5—8 évet is. Ennek következtében előfordulhat, hogy a kisgyermekek csontjaiban a  $^{90}\text{Sr}/\text{Ca}$  arány jóval felülmúlja a felnőtt emberi csont  $^{90}\text{Sr}/\text{Ca}$  arányát. Érdekes megfigyelés viszont, hogy a csecsemők csontjainak  $^{90}\text{Sr}$  tartalma rendkívül alacsony. Ez arra vezethető vissza, hogy — az állati szervezetekhez hasonlóan — az anya szervezete is jól diszkriminál, így az anyatej  $^{90}\text{Sr}/\text{Ca}$  aránya nagyságrendileg kisebb, mint az anya által fogyasztott tápláléké [99].

A szervezetből a stroncium a vizelettel és a bélsárral távozik. A vizelettel ürülő  $^{90}\text{Sr}$  mennyiségéből következtetni lehet a szervezetben levő  $^{90}\text{Sr}$  mennyiségére [15]:

$$A = 0,06 + 0,65a^{1/3}, \text{ ahol:}$$

$A$  a szervezetben levő aktivitás ( $\mu\text{Ci}$ )

$a$  a vizelettel naponta eltávozó aktivitás ( $\mu\text{Ci}$ ).

Megjegyzem, hogy a szervezet inkorporált izotópok sugárzásából adódó sugárterhelésének számításához az izotóp effektív felezési idejének ismerete is szükséges. Az effektív felezési idő a fizikai és a biológiai felezési időből számítható:

$$T_{\text{eff}} = \frac{T_{\text{fiz}} \cdot T_{\text{biol}}}{T_{\text{fiz}} + T_{\text{biol}}}.$$

A szervezetbe jutó radiostroncium mennyiségét döntően befolyásolják a táplálkozási szokások is. A tej és tejtermékek, a hús és tojás s a lisztből készült élelmiszerek radiostroncium tartalma alacsony, ugyanakkor a legtöbb növényi eredetű élelmiszer, így a főzelékfélék, gyümölcsök  $^{90}\text{Sr}$  szennyezettsége többszöröse az előbb említetteknek.

Az emberi szervezetben viszonylag egyenletesen eloszló  $^{137}\text{Cs}$  sugárterhelő hatása is függ a táplálkozási szokásoktól s az életkortól. Miután azonban a  $^{137}\text{Cs}$  főleg az izmokba jut, így biológiai felezési ideje nagyságrendileg kisebb a  $^{90}\text{Sr}$  esetében mérhetőnél. Az emberi szervezet egyébként a radiocéziumot dúsítja, így pl. az anyatejben a  $^{137}\text{Cs}:\text{K}$  arány nagyobb, mint a táplálékban. Az emberi testszövetekben jelenleg a  $^{137}\text{Cs}$  mennyisége 100 pCi/kg-nál kisebb érték, a maximum 1964—1965-ben volt mérhető [1], [8].

A női szervezet  $^{137}\text{Cs}$  eredetű sugárterhelése egyébként mintegy 35 %-kal kisebb mint a férfiak esetében, ezt részben a kisebb testsúly, részben az eltérő étkezési szokások okozzák [100].

Az élelmiszerekkel naponta a szervezetbe jutó aktív anyagok mennyiségéről a 12. táblázat tájékoztat.



## 12. TÁBLÁZAT

Az élelmiszerekből naponta felvett  $^{40}\text{K}$ ,  $^{90}\text{Sr}$  és  $^{137}\text{Cs}$  mennyisége pCi-ben

Év, hely	Aktivitás				Irodalom
	$^{40}\text{K}$	$^{90}\text{Sr}$	$^{90}\text{Sr/g Ca}$	$^{137}\text{Cs}$	
1964 Japán	—	—	—	107	[101]
1965 Csehszlovákia	—	—	34	95	[102]
1972 Csehszlovákia	—	—	6	11	[102]
1965 Lengyelország	2310	—	—	60	[103]
1966 Lengyelország	2470	—	—	47	[103]
1971 Lengyelország	—	23	—	—	[104]
1967 Közös Piac	—	12	17	—	[105]
1967 NDK	—	13	—	—	[106]
1969 Hollandia	—	11	—	27	[107]

Bár az emberi szervezetbe jutó radioaktív anyagok nagy része az élelmiszerek útján kerül a szervezetbe, de nem elhanyagolható a közvetlenül a levegőből belégzés útján, ill. az ivóvízzel a szervezetbe jutó radioaktív anyagok mennyisége sem. Éppen ezért nagyon fontos a levegő s a felszíni vizek radioaktivitásának rendszeres mérése is. Ezeknek a vizsgálatoknak az ad kihangsúlyozott jelentőséget, hogy az atomerőművek jelentős mennyiségű aktív izotópot juttatnak mind a légkörbe, mind felszíni vizekbe. 1969-ben pl. New York környékén az atomerőművek által kibocsátott radioaktivitásból eredő, s a belégzés során fellépő sugárterhelés 3,3 mrem, 1972-ben már 18,6 mrem volt [108].

Nézzünk néhány adatot a levegő radioaktív szennyezettségéről. Az amerikai kontinensen 1974-ben a levegő atomrobbantási kísérletekből eredő átlagos  $\beta$ -aktivitása 0,72 pCi/m<sup>3</sup> volt [109]. A levegő  $^{137}\text{Cs}$  tartalma Leningrád környékén 1966 óta átlagosan 10<sup>-15</sup> Ci/m<sup>3</sup>, 1963-ban amikor a maximumot mérték, ennél nagyságrendileg volt nagyobb [110]. 1970-ben a levegő átlagos  $^{85}\text{Kr}$  tartalma Nevada államban 12 pCi/m<sup>3</sup>, 1971—1972-ben a Szovjetunió európai területei felett 12—15 pCi/m<sup>3</sup> volt [111], [112]. 1973-ban az Atlanti óceán felett a levegő  $^7\text{Be}$  aktivitása átlagosan 10 pCi/m<sup>3</sup> volt, míg  $^{137}\text{Cs}$  esetében átlagosan 0,05 pCi/m<sup>3</sup>,  $^{144}\text{Ce}$  esetében 0,6 pCi/m<sup>3</sup> értéket mértek [115].

Az itt közölt adatok egy-két nagyságrenddel kisebb szennyezettséget mutatnak, mint a hazánkban érvényes szabványban [114] lerögzített értékek. Itt azonban ki kell hangsúlyozni, hogy a szabványban a levegőre, vízre megadott megengedhető maximális koncentrációk nem a teljesen veszélytelen, hanem a még elfogadható kockázati szintnek felelnek meg, hisz a genetikai hatásnak nincs küszöbdózisa. Mindenestre tény, hogy jelenleg a népesség nagy része a természetes eredetű sugárterhelésnél kisebb, vagy azzal legfeljebb azonos szintű mesterséges eredetű sugárterhelést kap, s a mesterséges eredetű sugárterhelés nagy része is medicínális eredetű [115]. Az évi természetes eredetű sugárterhelés egyébként 100 mrem/év körüli érték, s ennek jelentős része a levegő  $^{222}\text{Rn}$  tartalmából adódik [116], [117], [118], [119]. Ugyanakkor azonban kihangsúlyozandó, hogy a légkör  $^{85}\text{Kr}$  tartalma az intenzív atomerőmű program (főleg a reprocessálás) miatt egyre nő, s ez a probléma a jövőre nézve elég komolynak tűnik, ami vagy a reaktorfüttőelem-feldolgozó üzemekben keletkező  $^{85}\text{Kr}$  leválasztásával, vagy a fúziós típusú reaktorok üzembehelyezésével nyerhet megoldást [120].



Az emberi szervezetbe a radioaktív anyagok az ivóvíz útján is bekerülhetnek. Vegyük néhány adatot az irodalomból. A Szovjetunióban Minszk és Vilniusz környékén 1971—1972-ben a felszíni vizek  $\beta$ -aktivitása 3,8—8,9 pCi/l érték volt [121]. Az USA-ban 1974-ben a felszíni vizek átlagos  $^3\text{H}$  tartalma 200 pCi/l volt [130]. A Balti tenger vizének átlagos  $^{90}\text{Sr}$  tartalma 1972-ben 0,7 pCi/l,  $^{137}\text{Cs}$  tartalma pedig 0,9 pCi/l volt [122]. A magyarországi felszíni vizek radioaktivitása a 13. táblázatban látható [123], [124].

## 13. TÁBLÁZAT

Magyarország felszíni vizeinek átlagos radioaktivitása

Év	Aktivitás pCi/l			
	Duna	Tisza	Rába	Balaton
1963	13	22	18	—
1967	9	16	30	9
1969	4	14	37	6
1971	8	15	29	16

A felszíni vizek radioaktivitási adatait a szabvány [114] határértékeivel összehasonlítva látható, hogy a szennyezettség nem éri el a veszélyesnek minősíthető szintet. Esetenként azonban a Duna-víz  $\beta$ -aktivitása eléri a 30—35 pCi/l értéket, s ez arra figyelmeztet, hogy a jövőben is — különösen az egyre több Dunára települő atomerőmű miatt — indokoltak a rendszeres radiometriai vizsgálatok. Az atomerőművekből elsősorban  $^3\text{H}$ ,  $^{54}\text{Mn}$ ,  $^{58}\text{Co}$ ,  $^{60}\text{Co}$ ,  $^{65}\text{Zn}$ ,  $^{131}\text{I}$ ,  $^{134}\text{Cs}$ ,  $^{137}\text{Cs}$  jut a felszíni vizekbe. Tájékoztatásul közlöm, hogy 1975-ben a világon 45 országban mintegy 350 kutató reaktor működött, míg az energiatermelő reaktorok száma 130 volt.

Az eddig elmondottak azt bizonyítják, hogy az emberi szervezetet érő sugárterhelés nagy része a jelenlegi viszonyok közt természetes eredetű. Ezt a felismerést tükrözi a 14. táblázat is, amely a sugárterhelést okozó különböző tényezők várható genetikai kockázatát mutatják [125]. Összehasonlításként megemlítem, hogy pl. Magyarországon 1970-ben egy millió lakosra 224 halálos közlekedési baleset jutott.

Az élelmiszerek s az ivóvíz útján az emberi szervezetbe jutó radioaktív anyagok mennyiségének meghatározása céljából számos vizsgálatot végeztünk [126], [127], [128] [129]. A mérési eredményekből levonható fontosabb megállapítások a következők:

1. Az étrendvizsgálatok alapján megállapítottuk, hogy az emberi szervezetbe naponta átlagosan kb. 2 nCi aktivitású  $\beta$ -sugárzó anyag jut. Ennek döntő részét a

## 14. TÁBLÁZAT

A sugárterhelést okozó tényezők genetikai kockázata

Sugárterhelési tényező	Várható genetikai kockázat halálos eset/év·millió lakos
Természetes eredetű sugárterhelés	25
Medicinális sugárterhelés	8
Atomfegyverkísérletek sugárterhelése	3
Atomerőművek sugárterhelése	3



$^{40}\text{K}$  izotóp aktivitása képezi, a mesterséges eredetű sugárszennyezettség ennél egy nagyságrenddel kisebb, mintegy 200 pCi. Az 1974-ben Győrött februárban, júliusban és októberben 5–5 napon át végzett étrendminták vizsgálati eredményeit a 15. táblázat mutatja.

2. A győri és soproni ivóvíz  $\beta$ -aktivitása bár kisebb, de nem tér el szignifikánsan a Duna és a Rába vízének radioaktivitásától. A Fertő-tó vízének radioaktivitása viszont felülmúlja mind az ivóvíz, mind a folyóvizek aktivitását.

### 15. TÁBLÁZAT

Az étrendminták radiometriai vizsgálati eredményei

Minta	K	Ca	Összes	$^{40}\text{K}$	$^{90}\text{Sr}$	$^{90}\text{Sr}$ aktivitás pCi/g Ca
	mg		aktivitás		pCi	
1.	1540	1050	1450	1375	21	20
2.	1410	1410	1296	1259	10	7
3.	1950	780	1794	1741	12	15
4.	2030	810	1951	1813	11	13
5.	1180	930	1070	1054	8	9
6.	2130	710	2021	1092	7	10
7.	1660	880	1629	1482	17	19
8.	1580	690	1652	1411	17	25
9.	2790	620	2650	2491	23	37
10.	3280	690	4375	2639	31	45
11.	1640	870	1729	1465	13	15
12.	2500	920	2422	2233	17	19
13.	1830	1100	1682	1634	15	13
14.	2020	1010	1998	1804	19	19
15.	2470	1040	2353	2206	14	13
Átlag	2001	901	2005	1787	17	19

### Összefoglalás

Dolgozatomban a bioszféra radioaktív szennyezettségét befolyásoló egyes tényezők hatását elemzem, rámutatva egyúttal azokra a módszerekre is, amelyeknek alkalmazásával a kontamináció mértéke csökkenthető. A radiometriai jellegű vizsgálatoknak az ad kihangsúlyozott jelentőséget, hogy a környezet radioaktív szennyezettségének mértéke összefügg a mutációk számával, s ismert, hogy elméleti genetikai számítások szerint egy faj spontán mutációs rátájának megkétszereződése esetén fennáll a degeneráció veszélye.

Magyarországon a levegő—víz—talaj—növény—állat—ember biológiai lánc sugárszennyezettsége 1962—1965 között érte el a maximumot, utána csökkent, mintegy 6—8 éven át lényegében változatlan szintű volt, majd 1976-ban a kínai atomfegyverkísérletek miatt ismét emelkedett. A környezet radioaktív kontaminációjának további rendszeres ellenőrzése azért is fontos feladat, mert a nukleáris kísérletek mellett az egyre rohamosabban növekvő számú atomerőművek is jelentős mennyiségű aktív anyagot juttatnak a bioszféra különböző elemeibe.



## IRODALOM

1. *Andrási A., Bozóky L., Fehér I.*: Az emberi szervezetbe került radioaktív izotópok meghatározása egészszestszámlálóval. *Fizikai Szemle*, 18, 299—305, 1968.
2. *Hasanen E., Rahola T.*: Biological half-life of Cs—137 and Na—24 in man. *Ann. Clin. Res.*, 3, 236—240, 1971.
3. *Zinder H.*: Spaltprodukte chinesischer Kernwaffenversuche, nachgewiesen über dem Territorium der DDR. I—II. *Kernenergie*, 12 (6), 216—220, 1969, 13 (6), 186—188, 1970.
4. *Kovács Á., Szalay S.*: Kísérleti atomrobbantások időpontjának meghatározása a légkör radioaktivitása alapján. *ATOMKI Közl.*, 2 (3), 229—236, 1960.
5. *Berényi D.*: Nukleáris jelenünk és jövőnk. *Magyar Tudomány*, 20, 622—629, 1974.
6. *Баданина Н. Г., Каминкер Д. М., Коновалов Е. А., Коноплев К. А., Пикулик Р. Г., Плющанский Л. М., Сайков Ю. П.*: Радиоактивные выбросы реактора ВВР-М в атмосферу. *Атомная Энергия*, 38 (2), 94—95, 1975.
7. *Miserez A.*: Radioactivité des denrées alimentaires en 1967. *Mitt. Lebensmitt. Hyg.*, 59, 156—192, 1968.
8. *Poulheim K. F.*: Ergebnisse der Messungen mit dem experimentellen Ganzkörperzähler der Staatlichen Zentrale für Strahlenschutz der DDR. *Kernenergie*, 12 (4), 139—140, 1969.
9. *Kovács J.*: A környezetszennyezettség alakulása az élelmiszerek radioaktív szennyezettségének vizsgálata alapján. *Izotóptechnika*, 15 (2), 85—96, 1972.
10. *Hidvégi I.-né, Szentesi Gy.*: Élelmiszerek  $\beta$ -radioaktivitásának hosszútávú változása Békéscsaba vidékén. *Élelmiszervizsg. Közl.*, 20, 123—128, 1974.
11. *Гедеев Л. И., Иванова Л. И., Нелепо Б. А., Трусов А. Г.*: Современное состояние и меры снижения радиоактивной загрязненности водной среды. *Атомная Энергия*, 38 (5), 317—323, 1975.
12. *Pavlicsek I., Veres Á., Rakvácsné Szabó O.*: Természetes vizek trícium koncentrációjának mérése. *Izotóptechnika*, 15, 619—625, 1972.
13. Other data. *Radiat Data and Repts.*, 15 (9), 609—623, 1974.
14. Milk and food. *Radiat Data and Repts.*, 15 (12), 769—782, 1974.
15. *Nedelkovits J.* (szerk.): Élelmiszerek és mezőgazdasági termékek radioaktivitásának kialakulása és a szennyezettség vizsgálati módszerei. Budapest, MÉM, 1968.
16. *Csongor É.*:  $^{85}\text{Kr}$  az atmoszférában. *Fizikai Szemle*, 19, 33—35, 1969.
17. *André Läuchli*: Radioassay for  $\beta$ -Emitters in Biological Materials using Cerenkov Radiation. *Int. J. Appl. Rad. Isot.*, 20 (4), 265—270, 1969.
18. *Ceiger E., Trautmann Milton A.*: Jodine—131 in milk samples. *Radiat Data and Repts.*, 14 (12), 729, 1973.
19. *Eisenbund M.*: Environmental Radioactivity, Pergamon Press, London, 1963.
20. *Сивинчев И. В., Канарейкин В. А., Арутинов О. М.*: Изменение концентрации цезия в человеке. *Радиобиология*, 6, 822—825, 1966.
21. *Zier M.*: Die langlebige Radioaktivität der Luft und des Ausfalls in der DDR in den Jahren 1964 und 1965. *Kernenergie*, 10 (2), 59—64, 1967.
22. *Малахов С. Г., Бобовников П. И., Газиев Я. Ц., Мартыненко В. П., Махонько К. П., Назаров Л. Е., Тертышник Э. Г.*: Метеорол. аспекты радиоактивного загрязнения атмосферы. Ленинград, Гидрометеиздат, 242—252, 1975.
23. *Sapundziev S., Dimchev T., Naidenov M.*: Sr—90 content in certain mountain soils. *Dokl. Akad. Szelszkohoz. Nauk. Bolg.*, 3, 167—172, 1970.
24. *Nelson D. M., Romberg G. P., Prepeichal W., Spigarelli S. A.*: Effects of a routine radioactive release on aquatic radionuclide concentrations. *Proc. 15th Conf. Gr. Lakes Res., Wisc.*, 1972. *Int. Assoc. Gr. Lakes Res. Ann. Arbor, Mich.*, 260—269, 1972.
25. *Kaye S. V.*: Assessing potential radiological impacts to aquatic biota in response to the national environmental policy act (NEPA) of 1969. *IAEA—SM—172/74*.
26. *Polgár E.*: A környezet radioaktivitása ellenőrzésének újabb szempontjai, különös tekintettel az összes  $\beta$ - és  $\gamma$ -aktivitás rutin mérési módszereire. *Izotóptechnika*, 16, 113—122, 1973.
27. *Mészáros E., Simon A.*: A mesterséges eredetű radioaktív részecskék száraz és nedves kihullása a troposzférából. *Időjárás*, 71, 86—90, 1967.
28. *Simon A.*: A mesterséges radioaktív anyagok ülepedése a Kárpátmedencében 1964-ben. *Időjárás*, 69, 168—174, 1965.
29. *Махонько И. П.*: Самоочищение низшей тропосферы от радиоактивной пыли. *Физ. Атмосферы и Океана*, 2, 508—510, 1966.



30. Simon A.: A csapadék hatása a mesterséges radioaktív aeroszol koncentrációra. Időjárás, 68, 151—156, 1964.
31. Szabolcs L., Szabó A., Bende E.: A tej aktivitásának alakulása Győr-Sopron megyében 1968—1973 között. Tejipar, 23, 26—33, 1974.
32. Szabó A., Bende E.: A növények radioaktív szennyezettsége és a csapadékmennyiség közötti összefüggés. Időjárás, 78, 356—359, 1974.
33. Bende E., Szabó A.: A növények sugárszennyezettségét befolyásoló tényezők variancia analízise. Időjárás, 79, 291—293, 1975.
34. Szabó A., Bende E.: Adatok a környezet radioaktív kontaminációja és a csapadék mennyisége közötti összefüggéshez. Izotóptechnika, 18, 9—13, 1975.
35. Bende E., Szabó A.: A takarmány és a tej sugárszennyezettségét befolyásoló tényezők vizsgálata. Állattenyésztés, 24, 169—173, 1975.
36. Török I., Kovács J.: A talajok radioaktív szennyezettsége az ország különböző pontjain. Izotóptechnika, 16, 21—31, 1973.
37. Геденов Л. И.: Радиоактивность внешней среды. Атомная Энергия, 33 (2), 650—655, 1972.
38. Vrigazov A., Marinov V., Dimchev T.: Determining low-level activities of  $^{90}\text{Sr}$  in wheat and its distribution in grinding. Kernenergie, 11 (1), 23—28, 1968.
39. Simon A.: A léggör mesterséges eredetű béta-radioaktivitása Budapesten 1961—1965-ben. Időjárás, 70, 261—265, 1966.
40. Kopcewicz Th.: An attempt to explain temporary variations in ground air-layer pollution in Central Europe by radioactive substances deriving from nuclear explosions. Acta Geophysica Polonica, Vol. X. No. 4., 299—334, 1962.
41. Kastori R.: A fény hatása a kalcium felvételére és anyagcseréjére. Agrokémia és Talajtan, 18, 321—326, 1969.
42. Török I.: A Sr—89 adszorpciójának vizsgálata különböző talajokon. Agrokémia és Talajtan, 21, 355—362, 1972.
43. Гулякин И. В., Юдинцева Е. В.: Агрохимия радиоактивных продуктов деления. Докл. ТСХА, Москва, 139, 259—263, 1968.
44. Мельникова А. К., Кудела А. Д.: Радиоактивность почв и методы ее определения, Издательство АН СССР, Москва, 133—154, 1966.
45. Kalmár T.-né: Magyarország talajainak radioaktív szennyezettsége. Agrokémia és Talajtan, 23 (3—4), 351—360, 1974.
46. Squire H. M., Middleton L. J., Sanson B. F.: Changes of  $^{90}\text{Sr}$  and  $^{137}\text{Cs}$  contents in soils. Radioisotopes in Sci. Res., 4, 207—219, 1958.
47. Marckwordt U., Lehr J.: Factors of transfer Cs—137 from soils to crops. Rep. EUR—4800 (Vol. 1—2), 1057—1067, 1972.
48. McHenry J. R., Ritchie J. C., Gill A. C.: Accumulation of fallout Cs—137 in soils and sediments in selected watersheds. Water Resour. Res., 9, 676—686, 1973.
49. Bray J. R., Jackman R. H.: Soil and climatic factors related to Cs—137 content in New Zealand milk. N. Z. J. Sci., 11, 352—362, 1968.
50. Юдинцева Е. В., Гулякин И. В.: Агрохимия радиоактивных изотопов стронция и цезия. Атомиздат, Москва, 1968.
51. Иванов С. Н., Шагалова Е. Д.: О соотношении стронция-90 и кальция в некоторых минеральных и торфяноболотных почвах. Докл. АН БССР, Минск, 13, 3, 269—271, 1969.
52. Magnaval R.: Vegetable pollution through the soil. EURATOM Rep., No. 5000, 23, 1973.
53. Hebel R.: Der Gehalt verschiedenen Böden  $^{137}\text{Cs}$ , als Grundlage für gezielte Untersuchungen der  $^{137}\text{Cs}$  Kontamination von Lebensmittel tierischer Herkunft. Dt. Tierärztl. Wsch., 80, 404—408, 1973.
54. Fried M., Broeshart H.: The Soil Plant System in Relation to Inorganic Nutrition. Academic Press, New York London, 1967.
55. Szabó A., Kovács V.: Adatok egyes növények stroncium és cézium tartalmáról, s a stroncium és cézium felvételét befolyásoló tényezőkről. Bot. Közl., 62 (4), 255—257, 1975.
56. Szabó A., Bende E., Kovács V.: Adatok egyes növények cézium és stroncium tartalmáról. Növénytermelés, 25 (3), 225—229, 1976.
57. Csupka St.: Zusammensetzung zwischen dem  $^{137}\text{Cs}/^{90}\text{Sr}$  Verhältnis im radioaktiven Fallout und im Boden für den Zeitraum 1964 bis 1970. Kernenergie, 18 (2), 54—56, 1975.
58. Török I.: Az ország különböző pontjairól származó talajminták  $^{90}\text{Sr}$  szennyezettsége. Agro-kémia és Talajtan, 21, 315—320, 1972.



59. Máthé F.: Talajjavító anyagok kalciumtartalmának mozgása a talajban. Atomtechnikai Tájékoztató, 13, 96, 1970.
60. Rohleder K.: Untersuchungen über die Aufnahme radioaktiver Stoffe durch Grünkohl aus dem Boden und aus der Atmosphäre und Versuche zur Dekontamination. Z. Lebensmitt. Untersuch. 149 (10), 223—227, 1972.
61. Cseh E.: Viz- és iontranszport. Tankönyvkiadó, Budapest, 1972.
62. Szabó A.: A növények radioaktív szennyezése elleni védelem. Növénytermelés, 24 (3), 259—264, 1975.
63. Darab K., Török I.: A  $^{90}\text{Sr}$  mozgását és megkötődését befolyásoló néhány talajtani tényező vizsgálata. Agrokémia és Talajtan, 20, 147—156, 1971.
64. Kovács J.: Élelmiszer radioaktív szennyezettségi vizsgálatok 1972-ben és ezek értékelése. Élelmiszervizsg. Közl., 19, 11—28, 1973.
65. Ocker H. D.: Radionuclide contamination of grain. Ber. Getreidechem. Tag., Detmold, 163—166, 1968.
66. Kodaira K., Tsumura A.: Uptake of radioactive strontium and cesium in rice plants. J. of. Radiat. Res., 14, 31—39, 1973.
67. Mouceev И. Т., Тухомиров Ф. А., Алексахин Р. М.: Аккумуляция С-137 сельскохозяйственных растений, разведенных на высокощелочном черноземе. Агрохимия, № 9, 122—126, 1972.
68. Ramzajev P. V., Troitszkaja M. N., Itabullin M. S., Litver B. J., Nisnikov A. I., Teplik L. A.:  $^{137}\text{Cs}$ ,  $^{90}\text{Sr}$ ,  $^{210}\text{Pb}$  and  $^{210}\text{Po}$  in the food chain of lichen-reindeer-man. Health Phys. Probl. Intern., 25, 417—420, 1973.
69. Kovács J., Liszonyiné Gacsányi M., Kiss B., Nedelkovits J.: Élelmiszer radioaktív szennyezettségi vizsgálatok és a vizsgálati módszerek továbbfejlesztése a radiológiai hálózat adatai alapján Magyarországon 1975-ben. Élelmiszervizsg. Közl., 22, 117—125, 1976.
70. Kovács J., Predmerszky T., Róka O.: A környezet radioaktív szennyeződése. Fizikai Szemle, 18, 305—312, 1968.
71. Гольцев В. Ф., Алексахин Р. М.: К вопросу о сравнительном поведении стронция и кальция в почвах и поступление в сельскохозяйственные растения. Почвоведение, Москва, 12, 40—48, 1969.
72. Pelshenke P. F., Ocker H. D., Bolling H., Zwingelberg H.: Zur Dekontamination von Getreide. Getreide u. Mehl, 17, 77—80, 1967.
73. Judinceva E. V., Levina E. M., Nazarov V. S.: Accumulation of  $^{137}\text{Cs}$  in corn and Sunflower crops during its intake through the leaves in relation to the developmental phases of the plants and the age of the leaves. Dokl. Tyimirjazev Szelszkohoz akad. 183, 187—191, 1972.
74. Szabolcs L., Szabó A., Bende E.: Főzeléknövények és takarmányok radioaktivitásának alakulása Győr-Sopron megyében. Agrokémia és Talajtan, 23 (3—4), 361—375, 1974.
75. Szabó A., Bende E.: A radioaktív szennyezettség alakulása a talaj—növény rendszerben. Növénytermelés, 24, 21—26, 1975.
76. Szabó A.: Adatok egyes növények radioaktív szennyezettségéről. Botanikai Közl., 62 (2), 131—135, 1975.
77. Szabó A.: Adatok egyes félévek radioaktív szennyezettségéről. Az Erdő, 25 (2), 69—72, 1976.
78. Paulus K.: Zur Dekontamination von Rote Beete, Kohlrabi und Rosenkohl. Ind. Obs-Bemü-severw. 53, 635—638, 1968.
79. Paulus K.: Dekontamination von mit  $^{137}\text{Cs}$  und  $^{85}\text{Sr}$  kontaminiertem Blattge müse (Salat, Kohl, Spinat). Z. Lebensmitt. Unt. Forsch., 138, 329—334, 1969.
80. Ocker H. D.: Stand der Forshung auf dem Gebiet der Kontamination und Dekontamination von Getriede. Brot u. Gebäck, 23, 42—48, 1969.
81. Di Gleria J. (szerk.): Izotópok alkalmazása a mezőgazdasági kémiában és talajtanban. Akadémiai Kiadó, Budapest, 1966.
82. Vrigazov A., Marinov V.: Determining low-level activities of  $^{90}\text{Sr}$  in wheat and its distribution in grinding. Kernenergie, 11, 23—28, 1968.
83. Kovács J.: Az élelmiszerek radioaktív szennyezettségének 1971. évi vizsgálati adatai. Élelmiszervizsg. Közl., 18, 57—75, 1972.
84. Braude R., Glascock R. F.: A pilot plant for the removal of cationic fission products from milk. J. Dairy Res., 36, 129—136, 1969.
85. Харандзе П. В., Каландия А. А.: К вопросу дезактивации молока и подсолнечного масла от  $^{90}\text{Sr}$ . Шромеби, Тр. Груз. политехн. институт 3 (167), 79—82, 1974.
86. Ralls J. W., Maagdenbeerg H. J.: Removal of radioactive strontium and cesium from vegetables and fruits during preparation for preservation. J. Food Sci., 36, 653—656, 1971.



87. Kovács J.: Az élelmiszerek radioaktív szennyezettségének adatai és a vizsgálati módszerek fejlesztésével kapcsolatos kutatások Magyarországon 1974-ben. Élelmiszervizsg. Közl., 21, 107—116, 1975.
88. Csupka St.: Abschätzung des zukünftigen Niveaus von Radiostrontium im System Fallout-Futterpflanze-Milch. Kernenergie, 13 (12), 391—394, 1970.
89. Kovács J.: Élelmiszer radioaktív szennyezettségi vizsgálatok 1972-ben és ezek értékelése. Élelmiszervizsg. Közl., 19, 11—28, 1973.
90. Карасаев В.: Ветеринарно-санитарная оценка туш и органов животных, подвергшихся воздействию радиоактивных веществ. Мясн. Инд. 40, 19—21, 1969.
91. Sugár I.: Sejtmembránok alkáli iontranszportjának sztohasztikus modellje. Magyar Fizikai Folyóirat, 23, 1—42, 1975.
92. Szabó A., Bende E., Gyenese J.-né: Egyes hazai élelmiszerek sugárszennyezettségének vizsgálata. Élelmzési Ipar, 28, 10—12, 1974.
93. Bende E., Szabó A.: Fajlagos össz- $\beta$ -aktivitás vizsgálata Győr-Sopron megyei vizekben. Hidrológiai Közlöny, 403—405, 1974.
94. Szabó A., Bende E.: A sugárszennyezettség alakulása a takarmány—állat rendszerben. Állattenyésztés, 24 (2), 163—167, 1975.
95. Szabó A., Bende E.: Adatok egyes élelmiszerek lángfotometriásan mért stroncium és cézium mennyiségének értékeléséhez. Élelmiszervizsg. Közl., 21, 212—214, 1975.
96. Szabó A., Bende E.: Adatok a takarmány, tej, növedékmarha-csont és hal stroncium és cézium tartalmáról. Állattenyésztés, 25 (3), 277—279, 1976.
97. Szabó A.: Néhány adat élelmiszereink radioaktív szennyezettségéről. Orvosi Hetilap, 117 (17), 1023—1024, 1976.
98. Szabó A., Bende E.: Adatok az állati szervezetek  $^{90}\text{Sr}$ -ra vonatkozó diszkrimináló képességéről. Magyar Állatorvosok Lapja, 32 (8), 493—495, 1976.
99. Calapaj G., Ongaro D.: Observed ratios of  $^{90}\text{Sr}/\text{Ca}$  and  $^{137}\text{Cs}/\text{K}$  in the food of nursing mothers and in their milk. J. Dairy Res., 37, 1—7, 1970.
100. Andrási A., Fehér I.:  $^{137}\text{Cs}$  Burdens in the Adult Population of Budapest. Kernenergie, 12 (4), 134—135, 1969.
101. Suzuki Y., Nakamura R.:  $^{137}\text{Cs}$  Contents in Japanese from 1963 to 1971. J. Rad. Res. 15 (4), 181—188, 1974.
102. Csupka St.: Aufnahme der langlebigen Radionuklide durch die Nahrungsmittel im Zeitraum des höheren und des niedrigeren radioaktiven Fallouts in der Slowakei. Nahrung, 18 (5), 485—490, 1974.
103. Fietrzak—Flis Z.: Content of cesium—137 and potassium in diet of some population groups and some foodstuffs in Poland in 1965—1966. Skazenia Promieniotworcze Otoczenia, 115—127, 1969.
104. Porzucek H.: Radiodekontaminacja artykułow zwnosciowych. Przem. Spoz., 26 (10), 433—436, 1972.
105. Radioactive contamination of foods in the Countries of the Community in 1967. Eur. At. Energy Comm. EURATOM (Rep.) 1969, EUR—43—83, Avail Dep. CFSTI, 68 pp.
106. Schulze-Wollgast U.: Food contamination with  $^{90}\text{Sr}$  and  $^{137}\text{Cs}$  in GDR in 1967. Skazenia Promieniotworcze Otoczenia, 87—101, 1969.
107. Mattern F. C. M., Drost R., Strackee L.:  $^{90}\text{Sr}$  and  $^{137}\text{Cs}$  in the human diet in the Netherlands during 1969. Rijks Inst. Volksgezond. (Rep.) 1970, RA—41, 26 pp. Avail Dep, NTIS.
108. Terpilak Michael S., Jorgansen Bruce L.: Environmental radiation effects of nuclear facilities in New York State. Radiat. Data and Repts. 15 (7), 400—475, 1974.
109. Air and deposition. Radiat Data and Repts, 15 (12), 792—801, 1974.
110. Гедеонов Л. И.: Радиоактивность внешней среды. Атомная Энергия, 33 (2), 650—655, 1972.
111. Other data. Radiat Data and Repts. 15 (12), 802—841, 1974.
112. Тертышник Э. Г., Малахов С. Г.: Измерение концентрации криптона-85 в атмосферном воздухе. Тр. Инс. эксперим. метеорол. Гл. упр. гидрометеорол. службы при Советс Министров СССР, 3 (42), 60—64, 1974.
113. Виноградов А. С., Доманов М. М., Кодочигов П. Н., Нелепо Б. А., Трусов А. Г.: Исследование радиоактивности приподного слоя атмосферы в Аьлантическом Океане. Атомная Энергия, 36 (2), 145—147, 1974.
114. MSZ 62—69 Radioizotópok sugárzása elleni védelem.
115. Predmerszky T.: A hazai orvosi röntgen-munkahelyek sugárvédelmi helyzete. Fizikai Szemle, 25 (7), 265—267, 1975.



116. Tóth Á.: Radonmérés szcintillációs módszerrel. Magyar Fizikai Folyóirat, 13 (2), 129—155, 1965.
117. Morgan K. Z.: Rapid Methods for Measuring Radioactivity in the Environment. 1971—14—1. IAEA.
118. Ohlsen H.: Zur Ermittlung der Bevölkerungsbelastung durch natürliche äussere Strahlung auf dem Gebiet der DDR. Kernenergie, 13 (3), 91—96, 1970.
119. Fehér I., Gémesi J., Tóth Á.: A népesség természetes radioaktív izotópokból származó sugárterhelésének vizsgálata hazánkban. Fizikai Szemle, 25 (8), 292—295, 1975.
120. Csongor É.: Mérések a légkör radiokripton tartalmának növekedésére vonatkozóan. Izotóptechnika, 16, 96—104, 1973.
121. Буникис А. А., Карьялиш Н. В., Кундра А. С., Пятрационайте Р. Э., Liet TSR Aukstuju mokyklu mokslo darbai. Chemija ir chem. technol., Научн. тр. высш. учебн. заведений Лит. ССР. Химия и хим. технология. Вильнюс, Минск, 363—364, 1974.
122. Вакуловский С. М., Камрич И. Ю., Малахов С. Г., Рослый Е. И., Чумичев В. Б., Шкуро В. Н.: Содержание  $^{90}\text{Sr}$ ,  $^{137}\text{Cs}$  и трония в Балитском море в 1972. Атомная Энергия, 39 (3), 183—185, 1975.
123. Bozóky L., Kovács J., Predmerszky T.: Adatok a környezet és az élelmiszerek radioaktív szennyeződéséről Magyarországon. Időjárás, 281—283, 1967.
124. Kelemen L., Bártfai Szabó L., Mészner J.: Javaslat a Duna radioaktív szennyezésének nemzetközi ellenőrzésére a Duna menti országok atomenergiafejlesztési tervének figyelembevételével. Izotóptechnika 16, 654—662, 1973.
125. Fehér I.: Veszélyesek-e az atomerőművek a környezetre? Energia és Atomtechnika, 27, 318—320, 1974.
126. Bende E., Szabó A.: Radiológiai vízvizsgálatok és egyes élelmiszerek radioaktivitása Győr-Sopron megyében. Egészségtudomány, 19, 182—194, 1975.
127. Szabó A., Bende E.: Adatok egyes hazai élelmiszerek és étrendek radioaktív szennyezetttségéről. Izotóptechnika, 18, 342—347, 1975.
128. Szabó A., Bende E.: Egyes étrendek radiometriai vizsgálata. Magyar Radiológia, 28, 118—122, 1976.
129. Szabó A.: Angaben über die radioaktive Kontamination von Lebensmitteln in der Ungarischen VR. Die Lebensmittel Industrie, 23 (10), 457—458, 1976.







# KÜSZÖBÁLLAPOTOK HATÁSA AZ ELEKTROMÁGNESES ÁTMENETEKRE\*

CSERNAI LÁSZLÓ

MTA Központi Fizikai Kutató Intézet, Budapest

## TARTALOMJEGYZÉK

1. BEVEZETÉS .....	473
2. KÍSÉRLETI ÁTTEKINTÉS .....	476
3. A „PIGMY” ANOMÁLIA AZ ELMÉLETBEN .....	483
3.1 A küszöbállapotok hatása az E1 átmenetekre .....	483
3.2 Lyukrészcseke diagonalizációs számítások .....	486
4. LYUKRÉSZECSKE HÉJMODELL .....	489
4.1 Egyrészcseke hullámfüggvények meghatározása .....	489
4.2 Lyukrészcseke gerjesztések .....	491
4.3 A maradékkölcsönhatás mátrixelemei .....	494
5. ELEKTROMÁGNESES ÁTMENETEK ÉS A GAMMA-ERŐSSÉGFÜGGVÉNY .....	497
5.1 Dipól átmeneti valószínűség .....	497
5.2 Az erősségfüggvény bevezetése .....	498
5.3 A lecsatolódás és a kollektivitás vizsgálata .....	500
6. EREDMÉNYEK, ÖSSZEFOGLALÁS .....	501
7. KÖSZÖNETNYILVÁNÍTÁS .....	509
I. FÜGGELÉK .....	510
A dipól átmeneti valószínűség meghatározása .....	510
II. FÜGGELÉK .....	516
A gamma-erősségfüggvény .....	516
IRODALOM .....	522

## 1. Bevezetés

A jelen értekezés célja egy jelenségnek, az úgynevezett „pigmy” rezonanciának az elméleti vizsgálata és magyarázata. A „pigmy” rezonanciával (PR) kapcsolatban először az óriás dipól rezonancia (GDR) jelenségére kell emlékeztetnünk. (A szakirodalomban általánosan elfogadott rövidítés az angol „giant dipole resonance” elnevezéséből származik.)

Majdnem minden atommagnál fellép 10—20 MeV közötti gerjesztési energiánál egy igen erős, 4—5 MeV széles rezonancia, az ún. óriási dipól rezonancia. Bizonyos tömegtartományban egy kisebb rezonancia is észlelhető 5—8 MeV gerjesztési energiánál, ez a törpe vagy „pigmy” rezonancia.

Az óriás dipól rezonancia tulajdonságai jól ismertek. Az atommag gerjesztése legegyszerűbben úgy megy végbe, hogy az alapállapotban betöltött egyrészcseke nívók egyikéről egy nukleont a feljebb levő nem betöltött szintek egyikére gerjesztünk. Így egy lyukállapot és egy részcsekeállapot jön létre, amit röviden lyukrészcseke

\* Egyetemi doktori értekezés.  
Érkezett 1977. jan. 17.



( $1p-1h$ ) gerjesztésnek nevezünk. Igen sok ilyen lyukrészcseke gerjesztés létezik és a fizikailag megvalósuló állapotok ezen gerjesztések szuperpozíciójaként írhatók le. Az óriás rezonancia úgy jön létre, hogy a szuperpozícióban az egyes lyukrészcseke gerjesztések azonos előjellel fordulnak elő, így egymást erősítve egy kollektív állapotot hoznak létre (1. részletesebben a 3.1. pontban). Ha a lyukrészcseke állapotok és az alapállapot spinje és izospinje 1-el különbözik paritásuk pedig ellentétes, akkor az óriás dipól rezonanciát hozhatják létre, amely elsősorban gamma-sugárzás kibocsátásával bomolhat az alapállapotra. Az így létrejött kollektív állapot dipól átmeneti valószínűsége jóval nagyobb mint a többi állapoté, sőt az összegszabály által megszabott dipól erősség túlnyomó részét ez az állapot képviseli.

Ilyen magas energiákon azonban bonyolultabb szerkezetű, több lyuk több részcsekes gerjesztések, úgynevezett háttérállapotok is fellépnek, amelyek igen sűrűn helyezkednek el. Ezek kölcsönhatnak az egyszerűbb szerkezetű gerjesztésekkel, ami azt eredményezi, hogy az óriás dipól rezonanciában képviselt dipól átmeneti erősség az energiában közel fekvő háttérállapotokra oszlik szét. Az atommagok túlnyomó többségénél ezt az eloszlást a Lorentz-függvény nagyon pontosan írja le (1. ábra).

Néhány jól meghatározott tömegszám tartományban azonban szisztematikus eltéréseket tapasztaltak a Lorentz-függvénytől: Az óriásrezonancia mellett alacsonyabb energián egy kisebb „pigmy” rezonancia (PR) is fellépett, amely az összegszabály által megszabott erősség néhány százalékát képviselte. A pigmy rezonancia általános természetét mutatta, hogy  $(\gamma, \gamma')$ ,  $(\gamma, n)$ ,  $(n, \gamma)$ ,  $(d, p\gamma)$  reakciókban egyaránt észlelték [1, 14–24].

Az anomális viselkedés a gamma-erősségfüggvényen szemléltethető (lásd az ábrát), ahol a Lorentz-függvénytől való eltérés egy általában 5,5 MeV gamma-energiánál fellépő többlet erősségből mutatkozik. Ez azt jelenti, hogy egyes lyukrészcseke gerjesztések, vagy ezek egy csoportja nem válik teljesen az óriásrezonancia komponensévé hanem alacsonyabb energián egy független rezonanciát hoz létre és erősségét, legalábbis részben, megtartja. Ezt a jelenséget röviden az erősség lecsatolódásának nevezik. Mivel a jelenség nem csak egy-egy mag esetén jelentkezik, felmerül a kérdés mi lehet az az általános tulajdonság, ami az erősség lecsatolódását okozhatja és mely állapotok képesek erősségüket megtartani.

Érdekes párhuzamra mutatott rá Lane [2] felismerve, hogy az anomália éppen azokban a tömegszám-tartományokban jelenik meg, ahol egy kis impulzusmomentumú neutron egyrészcseke állapot a küszöb közelébe kerül. Ennek alapján feltételezték [3], hogy olyan lyukrészcseke gerjesztések képesek lecsatolódni az óriásrezonanciáról, amelyeknek részcseke komponense a fenti tulajdonságú küszöbállapot.

Néhány korábban végzett lyukrészcseke diagonalizációs héjmodell számítás szintén alátámasztotta ezt a feltevést. Az egyik M. K. Pal, S. M. Soper és A. P. Stamp által végzett ilyen számításról Lane-től tudunk [4]. Ebben a  $^{208}\text{Pb}$ -re vonatkozó számításban zérus hatótávolságú maradékkölcsönhatást alkalmaztak és ez a számítás 5,5 MeV-es energiánál a pigmy anomáliának megfelelő többlet erősséget eredményezett. S mi több, az erősséget olyan állapotok hordozták, melyeknek az  $s_{1/2}$ ,  $p_{1/2}^1$  lyukrészcseke komponens volt a fő összetevője, amely éppen egy a fenti tulajdonságokkal bíró neutron részcsekeállapotot tartalmaz.

A számításokat megismételték később realisztikusabb véges hatótávolságú maradékkölcsönhatást alkalmazva [5, 6], ezek azonban nem eredményeztek erősség-lecsatolódást az óriásrezonanciából. Az eredmények különbözőségét a maradékkölcsönhatáson kívül más tényezők, például a bázisválasztás különbözősége is okoz-



hatja. Az elvégzett számítások nem nyújtanak biztos támpontot az anomália okát illetően.

Dolgozatunk célja, hogy módszeresen megvizsgáljuk az anomália fellépését, héjmodell számítások segítségével. Feladatunk a következő:

a) el kell dönteni, hogy a maradékkölcsönhatás megválasztása mennyire befolyásolja az anomália felléptét, illetve erősségét,

b) meg kell vizsgálni, hogy a küszöbállapotok jelenléte mennyire befolyásolja az anomáliát.

Az első feladatot illetően jelenlegi konkrét számításainkban zérus hatótávolságú maradékkölcsönhatásokat vizsgáltunk. A

$$V(r_1, r_2) = -V_0 \delta(r_1, r_2) [\pi_t + p\pi_s] \quad (1.1)$$

alakban felírt maradékkölcsönhatás  $V_0$  és  $p$  paramétereit úgy választottuk, hogy az irodalomban [7, 8, 9] előforduló értékek határeseteit képviseljék. (A képletben  $\pi_t$  és  $\pi_s$  a triplett és szingulett projekciós operátorok.)

A küszöbállapotok hatásának vizsgálata nehezebb feladat, egy héjmodell számításban. Az egyrészesce hullámfüggvényeket az átlagpotenciálként alkalmazott Saxon—Woods potenciál határozta meg és ennek paraméterei befolyásolták az egyes lyukrészesce állapotok  $\varepsilon_p$ , illetve  $\varepsilon_n$  kötési energiát is. A küszöbállapotok hatásának kimutatására azt az ötletet alkalmaztuk, hogy egy sorozat számítást végeztünk, amelyben a Saxon—Woods potenciál sugarát  $R=r_0 A^{1/3}$  változtattuk. Így a hullámfüggvények és a kötési energiák is változtak, és néhány neutron egyrészesce állapot a küszöb közelébe került. (A konkrét számolásban, amelyet az  $^{116}\text{Sn}$  konfigurációjára végeztünk, ezek az állapotok a  $3p_{1/2}$ ,  $3p_{3/2}$  és a  $2f_{7/2}$  neutron állapotok voltak.) Az így nyert számításorozatban a sugarat, illetve a hozzá tartozó  $A$  tömegparamétert, csökkentve tanulmányozhattuk az anomália megjelenését, miközben az egyrészesce állapotok a küszöb közelébe kerültek.

A héjmodellszámításban adódó energiasajátértékek és a hozzájuk tartozó dipól átmeneti valószínűségek azonban a kísérleti eredményekkel nehezen hasonlíthatók össze, különösen olyan igen korlátozott bázis esetén, amelyet gépi lehetőségeink megengedtek.

A valódi atommagban egy egyszerű lyukrészesce gerjesztés, amelyet héjmodell sajátállapotok reprezentálnak számításunkban, szétterül a sűrűn fekvő komplikáltabb háttérállapotokra. Így a lyukrészesce állapot által képviselt dipól átmeneti erősség is széteszik. A kísérletek kiértékelésekor az adott energiaintervallumra szétszoltott átlagos dipól átmeneti szélességből határozzák meg az erősségfüggvényt. Az eredmények szemléletesebbé tétele, és a kísérletekkel való összehasonlíthatóság céljából a héjmodell sajátállapotok energiáit és átmeneti valószínűségeit felhasználva egy egyszerűsített módon erősségfüggvényt származtattunk. Az így kapott erősségfüggvényeken vizsgáltuk az anomália megjelenését.

A kezdeti eredmények azt mutatták [10], hogy célszerű az anomália tulajdonságait részletesebben megvizsgálni, ugyanis az anomália a küszöbállapotokból alkotott kollektív állapotoknak tűnt. Ezért a kollektivitás vizsgálatát igényesebb módon végeztük el és ez a pontosabb vizsgálat megerősítette az eredeti feltételezést.

Az erősségfüggvény bevezetése a héjmodellszámításban igen megkönnyítette az eredmények vizsgálatát, áttekinthetőségét az előző hasonló számításokhoz képest, és lehetőséget adott a kísérleti eredményekkel való összehasonlításra.



Az összevetés megkönnyítése érdekében és az előzmények részletesebb ismertetése céljából a 2. fejezetben áttekintjük a jellemzőbb kísérleti eredményeket. Az erősségfüggvény meghatározása a kísérleti eredményekből egyike a legösszetettebb kísérleti feladatoknak és napjainkban is az aktuális témák közé tartozik [11]. Ezt a kérdést röviden érinti a függelék erősségfüggvénnyel foglalkozó része.

A dolgozat 3. fejezete foglalkozik az anomália eddigi elméleti vizsgálatával, s ezen belül az ehhez a munkához hasonló héjmodell számításokkal.

A 4. fejezet a jelenlegi számítás részletesebb leírását tartalmazza, a matematikai modell ismertetésével.

Az 5. fejezet az elektromágneses átmenetekkel és az erősségfüggvénnyel foglalkozik. Egyes kérdéseket részletesebben a függelékben érintünk.

A 6. fejezet tartalmazza a számítási eredményeket, ezek értékelését és összefoglalását.

## 2. KÍSÉRLETI ÁTTEKINTÉS

Ahogy már a bevezetőben is említettük az óriásrezonancia energiatartományában a nívók sűrűsége igen nagy:  $\varrho \approx 10^4 - 10^5 \text{ MeV}^{-1}$  nagyságrendű. A nagyszámú eltérő szerkezetű nívó egyedi vizsgálata nem is lehetséges és nem is célszerű a statisztikus fluktuációk miatt. A sűrűn elhelyezkedő nívók között sok azonos spinű és paritású gerjesztés található. Ezek sűrűsége  $\varrho_J(E_\lambda)$ . Ezek az  $E_\lambda$  energiához közeli, állapotok azonos  $XL$  multipolaritású ( $X=E, M$ ; elektromos, illetve mágneses) sugárzással bomolhatnak az alapállapotra, vagy alacsonyabb  $E_\mu$  energián levő meghatározott nívókra. Az egyes  $E_\lambda$  körüli állapotok bomlásának  $\Gamma_\gamma$  parciális gamma-szélességeit is átlagolhatjuk és ezt az átlagolt mennyiséget jelöljük  $\bar{\Gamma}_\gamma^{(XL)}$  el. Ebben az energiatartományban az atommagok tulajdonságait az átlagos mennyiségek jobban megvilágítják, mint az egyes szintek individuális vizsgálata.

A gamma-erősség függvény is egy ilyen átlagolt mennyiség: az összszabályok által meghatározott multipól sugárzási erősség eloszlását írja le. (Részletesebben a IV. függelék tárgyalja):

$$f_{XL}(E_\gamma) = E_\gamma^{-(2L+1)} \bar{\Gamma}_\gamma^{(XL)} \varrho_J(E_\gamma). \quad (2.1)$$

A  $\bar{\Gamma}_\gamma^{(XL)} \varrho_J(E_\lambda)$  szorzat az  $E_\lambda$  körüli egységnyi energiatartományba eső összes gamma-szélesség. Az  $E_\gamma^{-(2L+1)}$  együttható a gamma-szélességben mindig fellépő energiafüggés kompenzálását szolgálja. A (2.1) alakban felírt erősségfüggvényt ezért redukált erősségfüggvénynek is szokták nevezni, ma már azonban az irodalomban is elhagyják a redukált jelzőt és így a dolgozatban is csak IV. függelékben fogjuk használni.

Az óriásrezonancia leírására ma már leggyakrabban az erősségfüggvényt használják. Így az erősségfüggvény fogalmának ismerete mint látni fogjuk, a pigmy anomália tulajdonságainak részletes leírásához is igen előnyösnek fog bizonyulni.

A különböző multipolaritású sugárzások erősségét már az extrém statisztikus modellben is összehasonlították [12] (I. Függelék). A legdominánsabb az  $E1$  átmenet. Ennek energiafüggését Brink és Axel [13, 14] határozta meg az előbbi modellnél realiztikusabban:

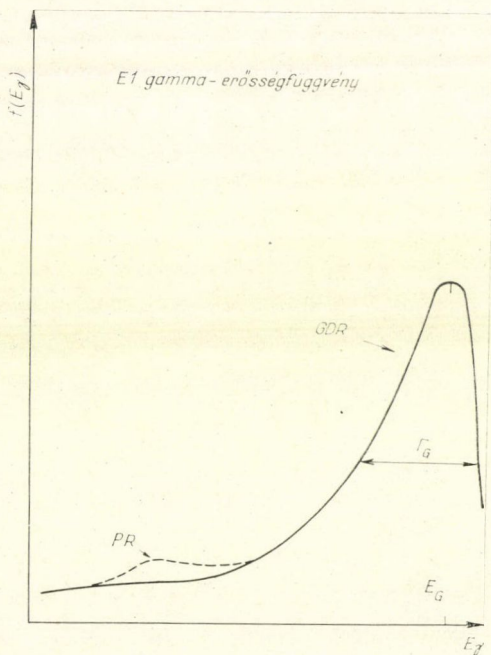
$$f_{E1}(E_\gamma) = K \frac{\Gamma_G E_\gamma}{(E_\gamma^2 - E_G^2)^2 + \Gamma_G^2 E_\gamma^2}, \quad (2.2)$$



ahol  $K$  az összecsabályból meghatározható állandó,  $\Gamma_G$  és  $E_G$  az elektromos dipól óriászrezonancia szélessége és energiája. Ez a Lorentz-görbéből származtatott alak, amelyre a későbbiekben sokszor hivatkozunk, mintegy bázisát képezi az összehasonlításoknak. Az  $E1$  óriászrezonanciát írja le, amely minden magon megfigyelhető és az utóbbi időben részletesen meghatározták paramétereit a magok többségére.

Fotoabszorpciós kísérletek eredményeit vizsgálva, az erősségfüggvény küszöb alatti energiatartományában található lokális szabálytalanságokra, azaz a Lorentz-görbétől való eltérésre Axel hívta fel a figyelmet először (1963) [15]. Az ekkor felmerült kérdések közül a legfontosabbak azok voltak, hogy mely tartományokban fordul elő eltérés, és mik a szabályosságai.

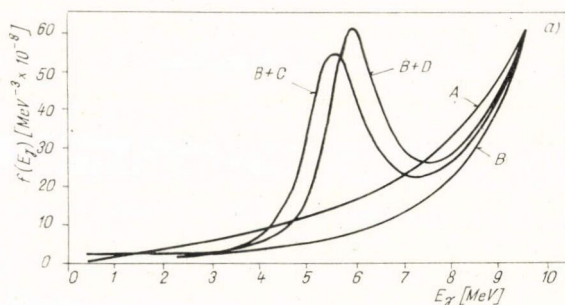
Az irregularitások közül az egyik jellegzetesebbet a több magnál 5,5 MeV gamma-energia körül fellépő többleterősséget észlelték. Kinsey és munkatársai mutattak rá 1951-ben [16], hogy ebben a tartományban az eredmények nem magyarázhatók a spektráeloszlás  $E_\gamma^3$ -os energiafüggése és az exponenciális szintsűrűsödés feltételezésével. (A spektráeloszlás és az erősségfüggvény kapcsolatát a II. függelék tárgyalja.) Később Bartholomew megállapította [17], hogy az 5,5 MeV-nél megjelenő intenzitás nem egyes anomálian nagy sugárzási szélességekből ered, ugyanis ebben a tekintetben az anomálian és nem anomálian viselkedő szomszédos magok nem mutattak eltérést. Kézenfekvő magyarázat lett volna szintsűrűségben levő szabálytalan viselkedéssel magyarázni az anomáliát, Bergqvist, Lundberg és Starfelt [18, 19]



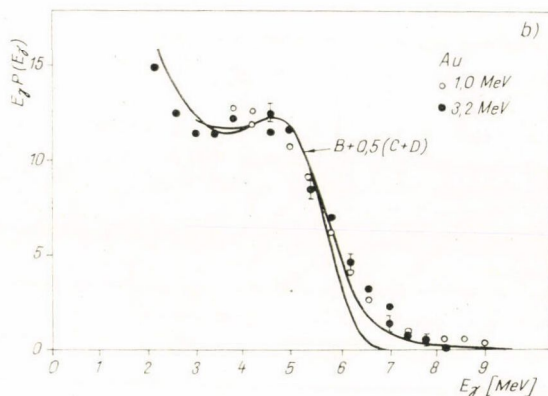
$$f(E_\gamma) = \frac{\bar{f}_\gamma(E_\gamma)}{E_\gamma^3} g(E) \sim \frac{E_\gamma}{(E_\gamma^2 - E_G^2)^2 + (\Gamma_G E_\gamma)^2}$$

1. ábra





1a ábra. Különböző elméleti gamma-erősségfüggvények. Az A és a B görbe az óriásrezonanciára illesztett Lorentz-függvény egy részletét ábrázolja. Ha ezen erősségfüggvényre 5,5 MeV, illetve 6 MeV gamma-energiánál egy-egy kisebb, „pigmy” rezonanciát szuperponálunk a B+C, illetve a B+D-vel jelzett erősségfüggvényeket kapjuk

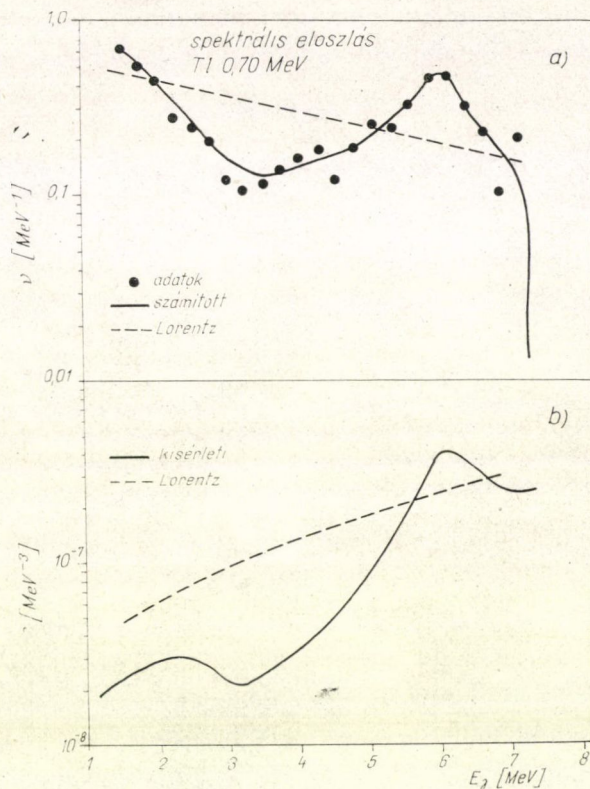


1b ábra. Az  $(n, \gamma)$  kísérleti eredményekből kapott spektráeloszlás. A mérési pontokra az az elméletileg számolt gamma-spektrum illeszkedik, amely „pigmy” rezonanciát tartalmaz [19]

$(n, \gamma)$  mérései azonban megcáfolták ezt a feltevést. Megmutatták, hogy az 5,5 MeV gamma-energiánál levő anomális csúcs függetlenül a neutron bombázó energiától,  $\sim 5,5$  MeV értéknél marad, pedig a bombázó energiát termikusról 4 MeV-ig változtatták, ezzel kizárták azt a lehetőséget, hogy a szintsűrűségben levő szabálytalanság okozza az anomáliát. Megmutatták ezen kívül, hogy az anomália leírható, ha az erősség-függvény szokásos Lorentz-görbéjére 5,5 MeV energiánál egy „pigmy” rezonanciát szuperponálnak. Az ilyen két komponensű erősségfüggvényből származtatott spektrum a kísérletekkel jó megegyezést mutatott. Az 1. ábrán láthatók a két rezonanciából összetett erősségfüggvények (a) és az ezekből számítható spektrumok (b) összevetve a kísérleti eredményekkel. (1. ábra)



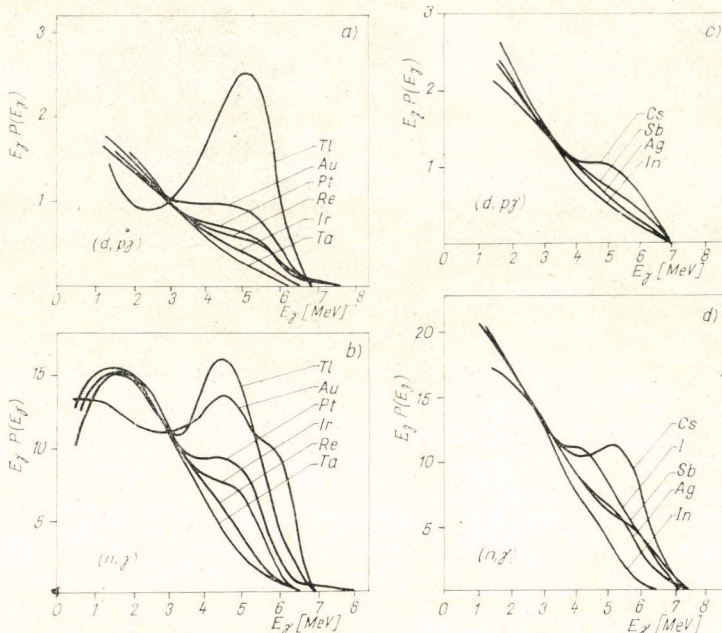
Nem sokkal ezután bebizonyították, hogy az anomália túlnyomórészt  $E1$  sugárzásból áll [20]. A kísérleti vizsgálatok a 70-es években kezdtek kiterjedni, főleg *Bartholomew* és társai munkája nyomán [21]. A vizsgálatokat  $(d, p\gamma)$  reakciókra is kiterjesztették, és itt is megfigyelték az anomáliát, melynek tulajdonságait most már részletesebben megismerték. A jellegzetes 5,5 MeV-nél levő csúcson kívül, a csúcsnál kisebb energiában  $\sim 3$  MeV-nél jellegzetes erősségcsökkenés lép fel. (2. ábra)



2. ábra. A  $\nu$  spektráloszlás és az  $f$  erősségfüggvény számított és észlelt értékeinek összehasonlítása. Az a) ábrán levő  $(d, p\gamma)$  mérési pontokra illesztett folytonos görbe az erősségfüggvényben a b) ábrán látható folytonos vonallal írható le. Ez 5,5 MeV-nél mutatja a legnagyobb pozitív irányú eltérést és  $\sim 3$  MeV-nél a legnagyobb csökkenést az óriásrezonanciára illesztett Lorentz-görbéhez viszonyítva [1]

Egy részletesebb elemzés azt mutatta, hogy az anomália legerősebben két tömegtartományban lép fel, a  $108 \leq A \leq 134$  és a  $182 \leq A \leq 208$  tartományban. A 3. ábrán láthatóak ezeken a tartományokon a simított gamma-spektrumok mind  $(n, \gamma)$ , mind  $(d, p\gamma)$  reakciók esetén [21]. (Meg kell jegyezni, hogy a normálás önkényesen történt, a normálás körüli problémákat a függelék tárgyalja). (3. ábra.)





3. ábra.  $(n, \gamma)$  és  $(d, p\gamma)$  reakciókból nyert spektrumok különböző elemeken. Az egyes görbék egy úgy normálták, hogy 3 MeV energiánál egyezzenek meg [21]

Az eddigiekben az  $(n, \gamma)$  és a  $(d, p\gamma)$  reakció gamma-spektrumaiból származtatott erősségfüggvényt vizsgáltuk. Az erősségfüggvényre azonban a fotoabszorpciós hatáskeresztmetszetekből is lehet következtetni (1. II. függelék). Itt a részecske küszöb alatti energián a  $\bar{\sigma}_{\gamma a}$  fotoabszorpciós hatáskeresztmetszet értékét a  $\bar{\sigma}_{\gamma\gamma}$  mért értékekkel azonosítják  $\bar{\sigma}_{\gamma a} \approx \bar{\sigma}_{\gamma\gamma}$ , a részecskeküszöb felett pedig  $\bar{\sigma}_{\gamma a} \approx \bar{\sigma}_{\gamma n}$  közelítést alkalmazták feltételezve, hogy a többi csatornák járuléka elhanyagolható. A 4. ábrán egy fotoabszorpciós hatáskeresztmetszet és a belőle származtatott erősségfüggvény látható, amely a  $^{208}\text{Pb}$  esetében végzett méréseket ábrázolja.

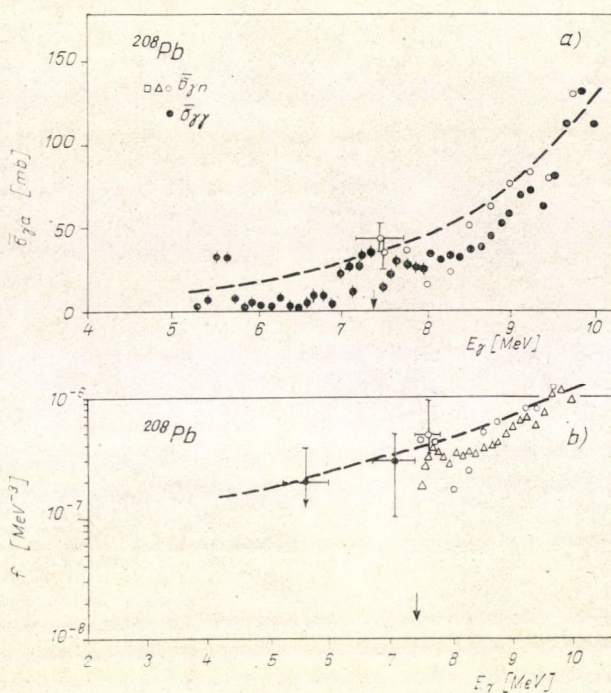
A nagy számú fotoabszorpciós kísérlet eredménye bizonyító erejű, és az, hogy az anomália ezekben a reakciókban is megjelenik az anomália általános természetére utal [22]. (4. ábra.)

Egyes magokban az anomália nem az 5,5 MeV körüli gamma-energiáknál lép fel. Az Sn páros izotópjain például Axel és társai [23] a  $\bar{\sigma}_{\gamma a}$  hatáskeresztmetszetből határozták meg az erősségfüggvényt és 8 MeV-es gamma-energia környékén tapasztaltak többlet-erősséget. (5. ábra, a)

Az  $^{117}\text{Sn}$  és  $^{119}\text{Sn}$  izotópban a foton emisszió viszonylag gyenge, így a  $\bar{\sigma}_{\gamma n}$  a  $\bar{\sigma}_{\gamma a}$  fotoabszorpciós hatáskeresztmetszetnek jó közelítését adja. Ezeken a hatáskeresztmetszeteken jól látható az anomália szerkezete egy 7,8 MeV-nél megjelenő többlet-erősséggel és egy kb. 7 MeV-nél fellépő hiánnyal. [24] (5. ábra, b)

Mindkét kísérletben tehát hasonló eredményt kaptak, ami azt jelenti, hogy az Sn izotópok esetében az anomália hasonló az 5,5 MeV-es anomáliákhoz csak magasabb energiákon jelenik meg ugyanaz a típusú szabálytalanság. Az egyik kísérleti





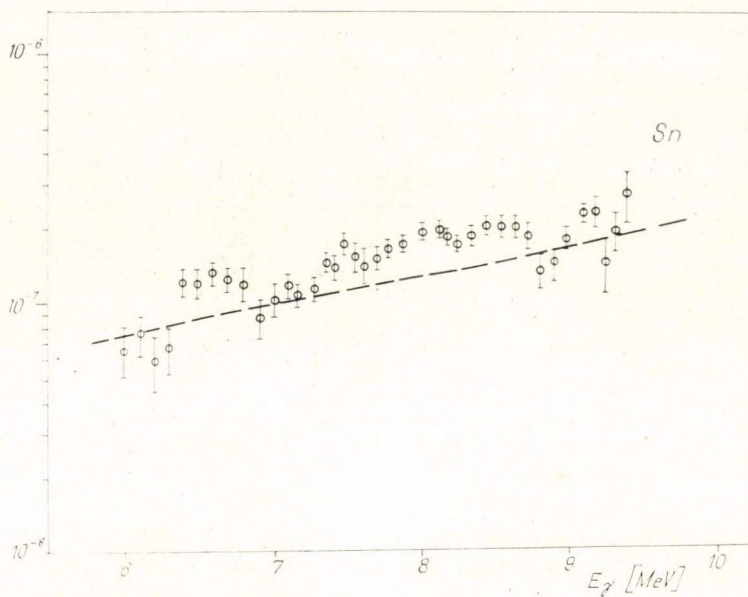
4. ábra. Különböző fotoabszorpciós kísérletekből [15, 22] nyert hatáskeresztmetszetek (a) és ezek felhasználásával számított erősségfüggvény értékek (b). A szaggatott vonal az óriásrezonanciára illesztett Lorentz-függvény

munkában [24] az anomália felléptét összekapcsolták a  $p$  állapotú neutronok küszöbével. (5. ábra.)

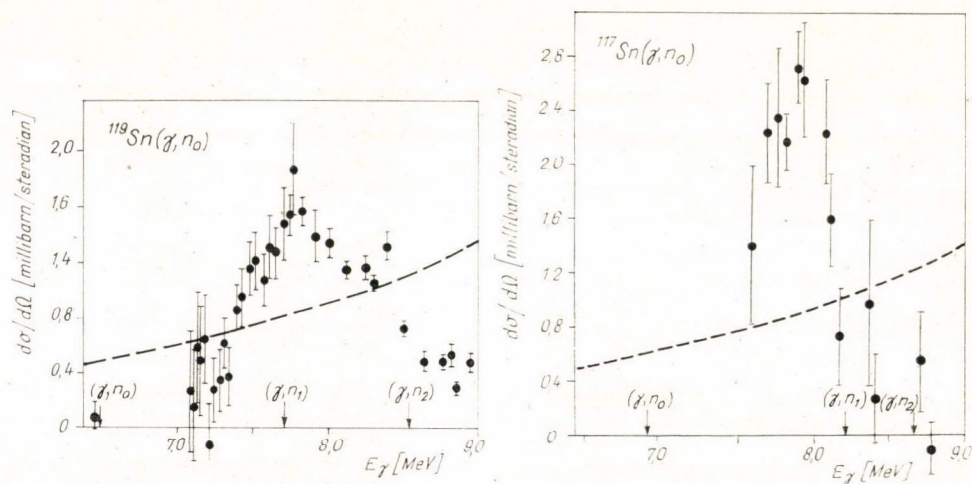
Végül meg kell említenünk Bartholomew [1] igen részletes összefoglalását az erősségfüggvények kísérleti vizsgálatáról. Ő szinte kitüntetett figyelmet szentel a fellépő anomáliának és példaképpen a  $182 \leq A \leq 208$  tömegszám tartományban össze is hasonlítja az anomális viselkedés mértékét. A 6a ábrán az 1–6 MeV közé eső erősség van feltüntetve mind a kísérleti eredményekből kiszámított, mind a Lorentz-görbéből kiszámított erősségfüggvények esetén. (A  $B(XL)$  redukált átmeneti valószínűség és az erősségfüggvény kapcsolatát a függelékben, (I. 29), (II. 7–8.), adjuk meg. Az eredmények azt mutatták, hogy ebben az energiatartományban az elméletileg becsült értékhez képest hiány mutatkozik, a kísérleti erősségösszegek általában az elméleti (Lorentz) felét teszik ki.

A 6b ábrán az anomália nagyságrendjét ábrázolják bizonyos értelemben. Az eltérés mértékének meghatározása céljából a kísérleti értékekre illesztett erősségfüggvényt eltolták úgy, hogy az 1–6 MeV intervallumban az erősségfüggvény integrálja megegyezzen a Lorentz-görbéből kapott erősségfüggvény integráljával. Ekkor a Lorentz-görbéhez képest az eltérés pozitív és negatív irányban is megegyezik. Ezt az





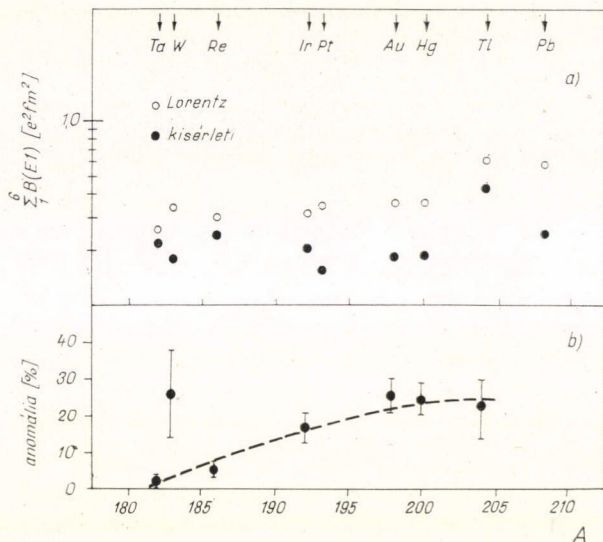
5a ábra. Az erősségfüggvény értékei az  $\bar{\sigma}_{\gamma a} \approx \sigma_{\gamma\gamma}$  fotóabszorpciós hatáskeresztmetszetéből számítva [23]. Feltételezték, hogy a hatáskeresztmetszethez csak azon izotópok adnak járulékot, amelyeknél a foto-neutron küszöb  $E_\gamma$  felett van



5b ábra. Differenciális hatáskeresztmetszetek  $(\gamma, n)$  reakciókra [24]. Mindkét esetben látható, hogy az anomális csúcs  $\approx 8$  MeV-nél jelenik meg



eltérést viszonyították a teljes összeghez, illetve integrálhoz és ez az eltérés van ábrázolva százalékban. Amint az eredményből látható, a  $^{208}\text{Pb}$ -hez közeledve az anomália fokozatosan erősödik, míg a  $^{208}\text{Pb}$  esetében nincs számottevő eltérés a Lorentz-görbétől. (6. ábra.)



6. ábra. A „pigmy” anomália erősségének függése a tömegszámparamétertől [1] alapján. Részletesebb magyarázat a szövegben

### 3. A „PIGMY” ANOMÁLIA AZ ELMÉLETEKBEN

#### 3.1. Küszöbállapotok hatása az E1 átmenetekre

Az anomália okainak vizsgálata előtt részletesebben meg kell ismerkedni az óriás dipól rezonancia leírásával. *Brown* és *Bolsterli* sematikus modellje [25] egyszerűen és frappánsan mutatja meg az óriásrezonancia keletkezésének okait. Tételezzünk fel egy zárt törzsű magot, amelynek átlagpotenciálja adott, és így az egyrészecske állapotok meghatározhatók benne. Ha az egyik  $j$ -vel jelzett betöltött egyrészecske állapotból egy nukleont az üres  $j'$  állapotba gerjesztünk a  $|j^{-1}j'\rangle$  lyukrészecske gerjesztést kapjuk. Egy ilyen lyukrészecske állapotból a részecske visszaugrásával a rendszer a  $|g\rangle$  állapotba jut és ekkor az  $\varepsilon_{jj'}$  energiát gamma-sugárzás formájában adja le. E1 sugárzás esetén az átmeneti valószínűsége a  $d(j^{-1}j') = \langle g | d | j^{-1}j' \rangle$  mátrixelem segítségével írható le, ahol  $d$  az elektromos dipól operátor.

A lyukrészecske állapotok kölcsönhatnak egymással és ennek hatására a fizikai állapotok a lyukrészecske gerjesztések szuperpozíciójaként állnak elő. Ha a sematikus modell szerint a maradékkölcsönhatás lyukrészecske állapotok között vett mátrixelemét a  $\xi \cdot d(j^{-1}j') \cdot d(j^{-1}j')$  szorzattal közelítjük, akkor a sajátállapotok energiáit és az egyes lyukrészecske komponensek együtthatóit egyszerű algebrai úton megkaphatjuk.



Az eredményből látható, hogy van egy olyan állapot, amelynek az energiája, pozitív  $\xi$  esetén a lyukrészcseke gerjesztések energiájánál lényegesen magasabbra tolódik el. Abban az esetben, ha a lyukrészcseke állapotok  $\varepsilon_{jj'}$  energiáit azonosnak vesszük akkor, az összes többi állapot azonos  $\varepsilon = \varepsilon_{jj'}$  energián marad míg ez az egy ( $|D\rangle$ ), az  $E = \varepsilon + \sum_{jj'} \xi d(j^{-1}j')^2$  energiára tolódik el. Még érdekesebb, hogy ez a  $|D\rangle$ -vel jelölt állapot fogja hordozni az összes többi állapot dipól erősséget,  $d^2(D) = \sum_{jj'} d^2(j^{-1}j')$  míg az összes többi állapotnak az alapállapotra való átmeneti valószínűsége nulla lesz.

Az izospint is figyelembe véve  $T=1$ -es lyukrészcseke gerjesztések esetén a sematikus modell  $\xi \cdot d(j^{-1}j')d(j^{-1}j')$  mátrixelemei pozitív  $\xi$ -vel, elég jól közelítik a realiztikusabb maradékkölcsönhatások mátrixelemeit és ebben az esetben  $|D\rangle$  állapot az óriás dipól rezonanciának feleltethető meg.

A modell jól magyarázza az óriás dipól rezonancia kollektív jellegét, nagy dipól átmeneti erősséget és megmutatható, hogy  $T=1$ -es gerjesztés a magban a protonok és neutronok egymással szemben történő oszcillációját írja le. A tapasztalatok azonban, mint láttuk, eltérést mutatnak ettől az egyszerű modelltől és bizonyos meghatározott esetekben  $E1$  erősség csatolódik le az óriásrezonanciáról.

Lane mutatta meg [2], hogy az anomália ott lép fel, ahol egy alacsony impulzusmomentumú neutron egyrészcseke állapot a küszöb közelébe kerül. A 7. ábrán láthatóak a neutron egyrészcseke energiák a tömegparaméter függvényeként (realisztikus Saxon—Woods potenciálban számított értékek [26] II. fejt. 4. par. 2,30 ábra).

Amint Lane is rámutatott a 180-as tömegszám-tartományban a 4s neutron állapot, az  $A=100-120$  tömegparaméterek körül a 3p állapot, míg az 50-es tömegszám-tartományban a 3s állapot kerül a küszöb közelébe. Az előző áttekintésben láthattuk, hogy ezek azok a tartományok, ahol a pigmy anomália fellép. Gyarmati és Zimányi feltételezte [3], hogy azok a lyukrészcseke-komponensek, amelyekben a részcseke-komponens egy küszöbhez közeli, alacsony impulzusmomentumú neutronállapot, képesek lecsatolódni az óriásrezonanciáról és egy külön kollektív állapotot hozhatnak létre. Ezt a feltevést alátámasztotta néhány csatolt-csatornás számítás [7, 8] eredménye, de még részletes vizsgálat ezen a téren nem történt.

A lecsatolódásnak egy másik lehetséges forrására is rámutattak [27] a lyukrészcseke-gerjesztések háttérállapotra való szétszórásánál. A Brown—Bolsterli-féle sematikus modellből kiindulva lyukrészcseke-gerjesztések közt a maradékkölcsönhatás mátrix-elemét a lyukrészcseke-gerjesztések alapállapotra való  $d(j^{-1}j')$   $E1$  mátrixelemeinek szorzatával közelítve,  $\langle j^{-1}j' | H | j^{-1}j' \rangle = \xi d(j^{-1}j')d(j^{-1}j')$ , mint láttuk arra az eredményre jutunk, hogy a dipól átmeneti erősséget egy  $|D\rangle$  állapot, az ún. óriás dipól rezonancia hordozza, míg a többi  $|\mu\rangle$  állapotok ebben a modellben elvesztik erősségüket,  $d(\mu)=0$ . Ha figyelembe vesszük, hogy a bonyolultabb szerkezetű  $|\lambda\rangle$  háttérállapotokkal való kölcsönhatás miatt ez a dipól erősség ezen  $|\lambda\rangle$  háttérállapotokra szétszórlik, a háttérállapotok dipól átmeneti erősségét a következőképpen írhatjuk:

$$d(\lambda) = \langle \lambda | D \rangle d(D) + \sum_{\mu} \langle \lambda | \mu \rangle d(\mu), \quad \text{ahol}$$

$$|d(D)|^2 + \sum_{\mu} |d(\mu)|^2 = \sum_{jj'} |d(j^{-1}j')|^2. \quad (3.1)$$

$d(\mu)$  azonban csak a sematikus modellben tűnik el, realiztikus esetben azt mondhat-







ahol

$$Q = 1 - |D\rangle\langle D|.$$

A második tagban fellépő extra erősségre a következő kifejezést adták:

$$d_b(j^{-1}j') = F_{jj'}(E_\lambda)(d(j^{-1}j') - d_r(j^{-1}j')), \quad (3.4)$$

ami azt fejezi ki, hogy a háttérállapotokra való eloszlás eredményeként az eredetileg az óriásrezonanciához csatolódott lyukrészcseke-erősség egy része visszakerül a lyukrészcseke-gerjesztéshez. Azt, hogy ez a hányad mekkora az  $F_{jj'}(E_\lambda)$  paraméter határozza meg. Az  $F_{jj'}(E_\lambda)$  faktor értéke általában  $F \ll 1$ . Egyes esetekben, mégpedig akkor, ha a  $|j^{-1}j'\rangle$  neutron lyukrészcseke-gerjesztés részecske állapotának energiája a küszöbhez tart,  $\varepsilon_{j'} \rightarrow 0$ , impulzusmomentuma alacsony,  $l' = 0, 1$ , az  $F$  faktor értéke elérheti az  $F \approx 1$  értéket. A lecsatolódás csak kötött neutron állapotok esetében lehetséges protonok és nem kötött részecskeállapotok esetén  $F \ll 1$ .

Az  $F_{jj'}(E_\lambda)$  értéknek minimuma van az  $E_\lambda = \varepsilon_{j'} - \varepsilon_j$  lyukrészcseke-energiánál és ettől az energiától távolodva az előbb említett esetekben növekszik. Ez a megállapítás jól egyezik az anomália energiatartományában fellépő erősséghiánnyal, amit a kísérleti összefoglalás végén említettünk, és azzal, hogy az anomália minden esetben egy többlet és egy hiány együttes megjelenésében mutatkozik.

A jelenség alapvető magyarázatához tartozik az ún. Brink hipotézis. Az anomális erősségfüggvények ugyanis függetlenül attól, hogy fotoabszorpciós vagy fotobomlási folyamatból kapták őket, megegyeztek, sőt az  $(n, \gamma)$  reakcióknál a bombázó energiától sem függtek.

Az erősségfüggvényeknek ezt a tulajdonságát jósolta meg Brink [13].

Az átmenet alapvető tulajdonsága egy lyukrészcseke-gerjesztés létrejötte, illetőleg bomlása attól függően, hogy melyik folyamatot vizsgáljuk. Fotobomlásnál a kezdeti állapot az energiában közeli, megegyező spinű és paritású állapotokkal keveredik, és ezek az állapotok mind egy lyukrészcseke-gerjesztéssel lejjebb levő, hasonló struktúrájú állapotra bomlanak. Ez a magyarázat alátámasztja a Brink hipotézist is, mivel az átmenetek egy tetszőleges struktúrájú állapotra ráépülő lyukrészcseke-gerjesztés létrejöttével vagy bomlásával modellezhetők.

Lane megmutatta, hogy az alapstruktúra, amelyre a lyukrészcseke-gerjesztés ráépül, a fotobomlási folyamat kezdeti állapotában is nagyrészt az alapállapot akkor, ha a részecske állapot energiája a küszöb közelében van [28].

### 3.2. Lyukrészcseke diagonalizációs héjmodell számítások

A fejezet első részében láthattuk, hogy az erősségfüggvény anomális viselkedése lyukrészcseke-gerjesztések hatásaként vizsgálható és így az egy lyuk-egyrészecske héjmodell és csatolt-csatornás számítások alkalmasak a körülmények elméleti vizsgálatára.

Lane hasonlítja össze néhány ilyen számítás eredményét [4]. Az egyik ilyen számítás [29] a  $^{208}\text{Pb}$   $1^-$ -os lyukrészcseke gerjesztéseit vizsgálja 15 MeV energiáig. 35 db lyukrészcseke állapotot tartalmazó bázist használtak, ebből 16 proton 19 neutron gerjesztés volt. Zérus hatótávolságú Wigner erőt alkalmazva a diagonalizálás során a dipól erősség (itt az erősségen a dipól mátrixelemek négyzete értendő) 90 %-a a  $11,5 \pm 1 \text{ MeV}$  tartományba csoportosult, ezt lehet az óriásrezonanciával azonosítani.



A maradék 10 %-ból, 4,6 % egy állapotban jelent meg 5,49 MeV energiánál. Nem volt egyetlen állapot sem, ezen kívül, amely az összes erősségnek akár 1 %-át is tartalmazta volna a legtöbbre  $\cong 0,1$  % erősség jutott. Az 5,49 MeV-nél fellépő jellegzetes állapot hullámfüggvényét vizsgálva egy figyelemre méltó tény derült ki. Ennek az állapotnak az erőssége azért nagyobb, mert bizonyos lyukrézecske ( $1p-1h$ ) állapotok ( $3p^{-3}4s$ ;  $3p^{-1}3d$ ;  $2f^{-1}3d$  neutron állapotok) lecsatolódtak az óriásrezonanciától és egy „pigmy rezonanciát” hoztak létre. A diagonalizáció eredményét az 1. táblázat mutatja az 5,5 MeV körüli energiatartományban.

1. TÁBLÁZAT

<sup>208</sup> Pb-re végzett diagonalizáció eredménye, Wigner erővel 35 db $1^-$ spinű $1p-1h$ bázison				
$E_i$ [MeV]	$\langle 3p_{1/2}^{-1} 4s_{1/2}   E_i \rangle$	$\frac{\langle E_i   D   g \rangle}{\langle 3p_{1/2}^{-1} 4s_{1/2}   D   g \rangle}$	$\langle 3p_{3/2}^{-1} 4s_{1/2}   E_i \rangle$	$\frac{\langle E_i   D   g \rangle}{\langle 3p_{3/2}^{-1} 4s_{1/2}   D   g \rangle}$
3,44	0,13	1,4	0,14	1,0
4,48	-0,41	0,14	-0,37	0,1
5,49	0,55	3,4	0,29	2,4
5,94	-0,11	-0,4	0,01	-0,3
6,17	0,13	-0,15	-0,10	-0,1
6,40	0,63	-1,23	-0,63	-0,86
6,43	0,10	-0,16	-0,10	-0,11
6,72	0,11	-0,30	-0,09	-0,21
6,98	0	-0,35	-0,05	-0,24
7,24	0,07	0,37	0,38	0,26
7,48	0,02	-0,24	0,06	-0,17
7,52	-0,01	-0,78	0	-0,55
7,59	0,10	-1,17	0,36	-0,81

Ha a maradékkölcsönhatást megváltoztatjuk, egy zérus hatótávolságú Rosenfeld-erőre, az eredmények részletei változnak ugyan, de az általános vonások megmaradnak. Ebben az esetben valamivel kevesebb dipól erősség jelenik meg 3 és 7,6 MeV között, ami annak tulajdonítható, hogy a  $3p^{-1} 3d$  állapotok most részben az óriás rezonanciához csatolódnak, és csak erősségük 50 %-át adják a pigmy rezonanciába. Az anomális viselkedés ebben az esetben 5,9 MeV körül jelenik meg és az egy állapotra jutó erősség csak 1,5 %-a az össz erősségnek az előbbi 4,6 %-hoz képest. Az eredmények változását a 2. táblázat mutatja.

Sajnos a fenti számítások és a <sup>208</sup>Pb  $1^-$  spinű állapotainak kísérletileg meghatározott  $E1$  parciális gamma-szélessége között az 5,5 MeV körüli tartományban eltérés van. A számítások ui. az 5—6,5 MeV tartományban  $\Gamma_\gamma$  szélességek összegére  $\sim 200$  eV -ot adnak (A Wigner-erő esetében ezt egy állapot hordozza, míg a Rosenfeld-erő esetében három) A kísérletekben ebben a tartományban az összes szélesség nem haladja meg a 14 eV -ot. Így a fenti számítások csak arra alkalmasak, hogy megmutassák a lecsatolódás lehetőségét és utaljanak okaira.

Más számítások [5] a <sup>208</sup>Pb  $1^-$  spinű állapotaira véges hatótávolságú maradékkölcsönhatással általános vonásaikban is különböző eredményeket adtak az 5,5 MeV körüli tartományban. Egy „önárnýékoló kicserélő tag”-ot alkalmazva a maradékkölcsönhatásban az 5—6,5 MeV tartományban összesen  $\sim 25$  eV gamma-szélességet kaptak, ami a kísérletekkel már összemérhető. Hasonlóan kis erősséget eredményeztek más számítások [6] is véges hatótávolságú erővel. Azt azonban, hogy a véges hatótávolságú erő megakadályozza a lecsatolódást, nem lehet állítani, ui. voltak olyan



## 2. TÁBLÁZAT

<sup>208</sup> Pb-re végzett diagonalizáció eredménye, Rosenfeld erővel 35 db 1 <sup>-</sup> spinű 1p—1h bázison				
$E_i$ [MeV]	$\langle 3p_{1/2}^{-1}4s_{1/2}   E_i \rangle$	$\frac{\langle E_i   D   g \rangle}{\langle 3p_{1/2}^{-1}4s_{1/2}   D   g \rangle}$	$\langle 3p_{3/2}^{-1}4s_{1/2}   E_i \rangle$	$\frac{\langle E_i   D   g \rangle}{\langle 3p_{3/2}^{-1}4s_{1/2}   D   g \rangle}$
3,75	0,23	-0,16	0,22	-0,11
4,46	0,10	1,08	0,08	0,77
5,04	0,56	0,34	0,33	0,25
5,70	0,48	1,95	0,04	1,37
5,87	0,45	1,40	-0,14	0,98
6,09	0,08	-0,17	-0,10	-0,12
6,25	-0,35	1,87	0,74	1,41
6,31	0,06	-0,75	-0,20	-0,52
6,33	0,06	-0,24	-0,07	-0,17
6,77	-0,01	-0,37	-0,04	-0,26
7,09	0,04	0,68	0,17	0,48
7,16	0,02	0,41	0,11	0,29
7,28	-0,02	-0,26	-0,05	-0,18
7,38	0,08	-0,60	0,14	-0,42
7,60	-0,16	0,59	-0,26	0,41

véges hatótávolságú maradékkölcsönhatással végzett számítások [30], melyek az anomália tartományban  $\sim 200$  eV össz gamma-szélességet eredményeztek, és az először említett szállítás [5] is 120 eV-os gamma-szélességre vezet ebben a tartományban, ha az „önárnyékoló kicserélő tag”-ot (self-screening exchange) elhagyjuk.

Szintén Lane közli [4] Soper <sup>60</sup>Ni-ra vonatkozó számítási eredményeit is. Ebben a számításban szintén zérus hatótávolságú maradékkölcsönhatást alkalmaztak és a diagonalizálást 20 db 1<sup>-</sup> spinű 1p—1h állapotot tartalmazó bázison végezték. A dipól-erősség (a mátrixelemek négyzetének összege) 83%-a 11,9 MeV-nél magasabb energián jelent meg, bár a bázisállapotok energiái ez alatt az energia alatt voltak. A bázisállapotok közül az  $1f_{7/2}^{-1}2d_{5/2}$  (proton),  $1f_{7/2}^{-1}1g_{7/2}$ ;  $2p_{3/2}^{-1}3s_{1/2}$   $2p_{3/2}^{-1}2d_{3/2}$  (neutron) állapotok teljesen lecsatolódtak az óriásrezonanciáról. A 4—9 MeV között megjelenő dipól-erősség 40 %-a a  $2p_{3/2}^{-1}3s_{1/2}$  (neutron) állapottól eredt.

Mint később Lane is megemlíti [28], ezek a számítások nem nyújtanak elegendő alapot az anomália viselkedésének tisztázására. Az látható, hogy főleg az alacsony impulzusmomentumú neutron-állapotok esetében lehetséges a lecsatolódás az óriásrezonanciától, azonban az, hogy ez a lecsatolódás mennyiben a küszöbhatás, és mennyiben a maradékkölcsönhatás, illetve a bázis függvénye, további számításokat igényel. Az esetek nagy részében több állapot csatolódik le az óriásrezonanciáról és ezek nem egy állapotba kapcsolódnak össze általában.

Ilyen esetekben a pigmy anomália és a számítási eredmények összehasonlítása igen nehézkes ui. nem lehet azt állítani, hogy a kísérletileg megfigyelt anomália valamely, a számításból kapott,  $|E_i\rangle$  állapottal lenne azonos. Ez indokolja a háttérállapotokra való szétterülés vizsgálatának szükségességét. (Ilyen vizsgálatokról számoltunk be a fejezet első részében).

Az elvégzett számítások során igyekeztünk figyelembe venni ezen tapasztalatokat és a küszöbállapotok és maradékkölcsönhatás változásának hatásán kívül a háttérállapotokra való szétterülést is modelleztük.



#### 4. LYUKRÉSZECSKE HÉJMODELL

Az  $A$  db nukleont tartalmazó magban fellépő dipól gerjesztéseket akarjuk vizsgálni. Feltételezzük, hogy csak egy lyuk-egyrészecske ( $1p-1h$ ) gerjesztések lépnek fel. Az ennél bonyolultabb állapotokat háttér állapotoknak tekintjük, és hatásukat majd a későbbiekben modellezzük.

A mag alapállapotát jelöljük  $|g\rangle$ -vel, az alapállapot spinje és paritása legyen  $J^\pi=0^+$ , feltételezzük, hogy az alapállapot hullámfüggvénye egyrészecske állapotokból alkotott determináns. Ezek az egyrészecske hullámfüggvények az alapállapotban egy Hartree—Fock számítással határozhatók meg. A Hartree—Fock számításban nyert önkonzisztens (self-consistent) potenciálban  $A$  db részecske a legmélyebb energiájú  $A$  db állapotot tölti be. Ezeket az alapállapotban betöltött állapotokat „ $h$ ” indexszel jelöljük, míg az ezen energia feletti nem betöltött, de még kötött állapotokat „ $p$ ” indexszel. A számítások során a Hartree—Fock potenciált egy rögzített Saxon—Woods potenciállal közelítettük.

##### 4.1. Egyrészecske hullámfüggvények meghatározása

Egy tetszőleges „ $q$ ” indexszel jelölt ( $q=p, h$ ) részecske hullámfüggvényét a

$$H_0 \Phi_q(r) = \varepsilon_q \Phi_q(r) \quad (4.1)$$

Schrödinger egyenlet megoldásaként kapjuk meg, ahol

$$H_0 = [T_1 + V_{sw}] \quad (4.2)$$

a  $T_1$  egyrészecske kinetikus energia operátor és a  $V_{sw}$  egyrészecske potenciál összege. A „ $q$ ” index az egyrészecske állapot kvantumszámait jelzi,  $q \equiv \{n_q, j_q, l_q, m_q, \tau_q, \varepsilon_q\}$  ahol  $n_q$  a főkvantumszám,  $l_q$  a pálya impulzusmomentum,  $j_q$  a teljes impulzusmomentum  $\left(j_q = l_q \pm \frac{1}{2}\right)$ ,  $m_q$  a teljes impulzusmomentum  $z$ -komponense,  $\tau_q$  az izospin  $z$  komponense  $\left(+\frac{1}{2}$  protonokra és  $-\frac{1}{2}$  neutronokra) és  $\varepsilon_q$  az egyrészecske állapot energiája. Ha a  $\Phi_q(r)$  hullámfüggvényt a

$$\Phi_q(r) = \frac{v_q(r)}{r} \sum_{\lambda_q \mu_q} (l_q \lambda_q \frac{1}{2} \mu_q | j_q m_q) \{i^{l_q} Y_{l_q \lambda_q}(\hat{r})\} x_{\frac{1}{2} \mu_q} x_{\frac{1}{2} \tau_q} \quad (4.3)$$

alakban keressük, a  $v_q(r)$  radiális rész megoldását a

$$\frac{d^2}{dr^2} v_q(r) = \alpha_q(r) v_q(r) \quad (4.4)$$

egyenlet határozza meg, ahol

$$\alpha_q(r) = k_q^2 + \frac{l_q(l_q+1)}{r^2} + v_c(r, z) + u \cdot f(r) + 2w \frac{(j_q - l_q)(2l_q + 1) - \frac{1}{2}}{ar} f(r) \cdot [1 - f(r)]. \quad (4.5)$$



Ebben

$$k_q^2 = \frac{2\mu}{\hbar^2} [\varepsilon_q],$$

$$w = \frac{2\mu}{\hbar^2} V_s, \quad V_s \text{ a spin-pálya kölcsönhatás erőssége,}$$

$$u = \frac{2\mu}{\hbar^2} V_\tau, \quad V_\tau \text{ a Saxon Woods potenciál mélysége,}$$

$$\mu = m_{\text{nucl.}} \frac{A-1}{A},$$

$$v_c(r, Z) = \delta_{\frac{1}{2}\tau} \frac{2\mu}{\hbar^2} Z e^2 \begin{cases} 3 - \left(\frac{r}{R_c}\right)^2 & ; \quad r \leq R_c \\ \frac{1}{r} & ; \quad r > R_c \end{cases}$$

$R_c$ ,  $R$  és „ $a$ ” a potenciál paraméterei,  $R = r_0 A^{1/3}$ ,  $R_c = r_c A^{1/3}$ ,

$$f(r) = \left[ 1 + \exp\left(\frac{r-R}{a}\right) \right]^{-1}.$$

A megoldáshoz szükséges határfeltételek:

$$v_q(r)|_{r \rightarrow 0} = 0, \quad v_q(r)|_{r \rightarrow \infty} = 0.$$

A megoldásokat 0 és 20 fm között határoztuk meg. Ennek megfelelően a határ fel-tételnél a megfelelő aszimptotikus viselkedést vettük figyelembe (Hankel, illetve Whittaker függvények). Az origóból kifelé és a 20 fm sugártól befelé indított meg-oldások csak egy meghatározott  $\varepsilon_q$  értéknél voltak összeilleszthetők és így iterációval határoztuk meg az  $\varepsilon_q$  sajátértéket. A számítások során az  $\text{Sn}^{116}$  konfigurációjának megfelelő állapotokat kerestünk. A Saxon—Woods potenciál paramétereit a 3. táb-lázat tartalmazza.

### 3. TÁBLÁZAT

A Saxon—Woods potenciál paraméterei	
proton $\tau = \frac{1}{2}$	neutron $\tau = -\frac{1}{2}$
$r_0 = 1,27 \text{ fm}$	1,27 fm
$a = 0,67 \text{ fm}$	0,67 fm
$V_r = -55,5 \text{ MeV}$	-46,5 MeV
$V_s = -8 \text{ MeV}$	-8 MeV
$r_c = 1,3 \text{ fm}$	1,3 fm
$Z = 50$	

Visszatérve a fő gondolatmenetre itt kell megemlíteni, a 3. fejezet végén említett feladat megoldását. A lyukrészcseke állapotok közötti maradékkölcsönhatás, és a háttérállapotokra való szétterülés hatásán kívül a küszöbállapotok hatásának ki-



mutatása volt az említett feladat. Ez utóbbira a Saxon—Woods potenciált használhatjuk fel, ugyanis a potenciál paraméterei határozzák meg a részecskék  $\epsilon_q$  energiáját és így azt, hogy mely részecskék és mennyire közel jutnak a küszöbhez. Az  $\epsilon_q$  kötési energiákra leginkább a potenciálgödör mélységének, illetve sugarának változtatása hat. Ezen paramétereknél azonban nehéz eldönteni, hogy milyen mértékben kell megváltozniok, hogy észrevehető változást okozzanak, és hogy a küszöbhatásból eredő változások mutatkozzanak meg. A tömegparaméter változtatásával azonban ugyanilyen hatást érhetünk el, ez ugyanis lényegében az  $R$ ,  $R_c$  sugarat változtatja és így befolyásolja az  $\epsilon_q$  kötési energiákat.

Arra pedig, hogy az  $A$  tömegparamétert milyen tartományban változtassuk, a 2. fejezet végén találunk útmutatást. A 6. ábrán látható, hogy az  $Az=180-280$  tartományban, hogyan változik az anomália erőssége. Így  $A$  hasonló mértékű változtatása esetén várhatjuk, hogy az egyes egyrészecske állapotok küszöbhez való közeldése már az erősségfüggvényben kimutatható eltéréseket okoz.

Összefoglalva, tehát annak eldöntésére, hogy a küszöb hatás létezik-e, egy sorozat számítást végeztünk minden maradékkölcsönhatás esetében a Saxon—Woods potenciál sugarának ( $R=r_0A^{1/3}$ ) változtatásával úgy, hogy a potenciál által meghatározott neutron egyrészecske állapotok energiái fokozatosan a küszöb közelébe kerüljenek. A potenciálgödör sugarát meghatározó tömegparaméter  $A=116, 120, 124, 128, 132$  értékeire végeztük el a számításokat.

#### 4.2. Lyukrészecske gerjesztések

Az előbbi pontban röviden vázoltuk az egyrészecske állapotok származtatását. Az atommag alapállapotában ezen egyrészecske állapotok közül a legmélyebb energiájú  $A$  db be van töltve. A legnagyobb energiájú betöltött szint energiája adja a Fermi energiát. A Fermi szint alatti állapotokat a  $h \equiv \{n_h, j_h, l_h, m_h, \tau_h, \epsilon_h\}$  indexszel jelöljük, míg a Fermi szint felettieket  $p \equiv \{n_p, j_p, l_p, m_p, \tau_p, \epsilon_p\}$ -vel.

Lyuk állapotot úgy kapunk, ha az alapállapotból az egyik betöltött  $\bar{h}$  egyrészecskeállapotban levő nukleont elvesszük, és így egy  $(A-1)$  nukleont tartalmazó rendszert kapunk. Ahhoz, hogy az  $(A-1)$  nukleont tartalmazó rendszer  $h^* \equiv \{n_h, j_h, l_h, m_h, -\tau_h, \epsilon_h^*\}$  kvantumszámokkal rendelkező „lyuk-állapotát” kapjuk, az  $A$  nukleon rendszer alapállapotából a  $\bar{h} \equiv \{n_h, j_h, l_h, -m_h, \tau_h, \epsilon_h\}$  egyrészecske állapotot kell elvonnunk. Az  $\epsilon_h^*$  energia az alapállapot energiájára van vonatkoztatva és  $\epsilon_h^* = -\epsilon_h$ .

Használjuk a betöltési szám reprezentációt: legyen az  $a_p^+$  operátor az, amely egy részecske állapotot kelt a Fermi szint felett  $p$  kvantumszámokkal, az  $a_{\bar{h}}$  pedig amely a Fermi szint alatti  $\bar{h}$  kvantumszámokkal jellemzett részecskét eltüntet (ez tehát a  $h^*$  lyukállapotot kelti). A részecske és lyukállapotot eltüntető operátorok ezek szerint  $a_p$  és  $a_{\bar{h}}^+$ . Ezek az operátorok eleget tesznek a következő antikommutátor relációknak:

$$[a_p^+, a_{p'}]_+ = \delta_{pp'} \quad [a_{\bar{h}}^+, a_{\bar{h}'}]_+ = \delta_{\bar{h}\bar{h}'} \quad (4.6)$$

Az összes többi antikommutátor zérus.

Az alapállapotra való hatásuk:

$$a_p|g\rangle = 0, \quad a_{\bar{h}}^+|g\rangle = 0. \quad (4.7)$$

Egy  $c \equiv \{n_p, j_p, l_p, \tau_p, n_h, j_h, l_h, \tau_h \equiv \tau_p\}$ -vel lyukrészecske állapotot a  $h^*$  lyukállapot



és a  $p$  részecskeállapot létrehozásával nyerhetünk:

$$|\Phi_c(JM)\rangle = \sum_{m_p m_h} (j_h m_h j_p m_p | JM) (-1)^{j_h - m_h} a_p^+ a_h |g\rangle. \quad (4.8)$$

A lyukállapotban az eltüntetett  $\bar{h}$  állapot  $\tau_h$  izospin harmadik komponense megegyezik a  $p$  részecske állapot  $\tau_p$  izospin harmadik komponensével.  $A(-1)^{j_h - m_h}$  szorzó tényező a betöltési szám reprezentációjában fellépő felcserélésekből adódik és azt biztosítja, hogy a  $h^*$  lyukállapot forgatási transzformációkra a részecskeállapotokkal azonos módon viselkedjen. A konkrét számításokban az  $^{116}\text{Sn}$  konfigurációjának megfelelő 20 db  $1p-1h$  állapotból álló bázist alkalmaztunk, amelyek spinje és paritása  $J^\pi = 1^-$  volt. A bázis  $c$  kvantumszámait a 4. táblázat tartalmazza.

#### 4. TÁBLÁZAT

A lyukrészecske bázis kvantumszámait							
$c$	neutron $p-\bar{h}$				$c$	proton $p-\bar{h}$	
1	3p	1/2	—	3s	1/2	2d	3/2 — 2p 1/2
2	3p	3/2	—	3s	1/2	3s	1/2 — 2p 1/2
3	3p	3/2	—	2d	5/2	3d	3/2 — 2p 3/2
4	2f	7/2	—	1g	7/2	14	3s 1/2 — 2p 3/2
5	2f	7/2	—	2d	5/2	15	2d 5/2 — 2p 3/2
6	2f	7/2	—	1g	9/2	16	2d 3/2 — 1f 5/2
7	1h	11/2	—	1g	9/2	17	1g 7/2 — 1f 5/2
8	2d	3/2	—	2p	1/2	18	2d 5/2 — 1f 5/2
9	2d	3/2	—	2p	3/2	19	1g 7/2 — 1f 7/2
10	2d	3/2	—	1f	5/2	20	2d 5/2 — 1f 7/2

Az  $A$  nukleont tartalmazó mag egy gerjesztett állapotát a (4.8)-ban definiált lyukrészecske bázisállapotok szuperpozíciójaként írhatjuk fel:

$$|\psi(JM)\rangle = \sum_c A_c |\Phi_c(JM)\rangle = \sum_c A_c \sum_{m_p m_h} (j_h m_h j_p m_p | JM) (-1)^{j_h - m_h} a_p^+ a_h |g\rangle. \quad (4.9)$$

Az  $A_c$  nem függ az  $m_p, m_h, M$  impulzusmomentum harmadik komponensektől, ezek ugyanis a Clebsch—Gordan együtthatóban expliciten figyelembe vannak véve.

A Schrödinger egyenlet az  $A$  nukleont tartalmazó atommag  $J^\pi$  spinű és paritású  $1p-1h$  gerjesztéseit tartalmazó állapotokra a következőképpen írható

$$(H - E)\psi(JM) = 0, \quad (4.10)$$

ahol  $E$  az állapot teljes energiája és a  $H$  Hamilton operátor alakja a betöltési szám reprezentációjában:

$$H = \sum_{ij} \langle i | T_1 | j \rangle a_i^+ a_j + \sum_{ijkl} \langle ij | V | kl \rangle a_j^+ a_i^+ a_k a_l. \quad (4.11)$$

Ebben a kifejezésben

$$\langle i | T_1 | j \rangle = \int dr \Phi_i^*(r) T_1 \Phi_j(r), \quad (4.12)$$

$$\langle ij | V | kl \rangle = \int dr_1 dr_2 \Phi_i^*(r_1) \Phi_j^*(r_2) V(r_1, r_2) \Phi_k(r_1) \Phi_l(r_2) \quad (4.13)$$

és az összegző indexek a  $q$  minden (betöltött és betöltetlen) értékét felveszik.



Ha a mag állapotait a (4.9)-ben definiált  $1p-1h$  gerjesztésekkel akarjuk leírni, a hullámfüggvény (4.9) alakját a (4.10) Schrödinger egyenletbe helyettesítve az  $A_c$  együtthatókra és az  $E$  energiára vonatkozó sajátérték egyenletet kapunk.

$$\sum_{c'} \sum_{\substack{m_p' m_h' \\ m_p m_h}} (-1)^{j_h - m_h + j_h' - m_h'} (j_h m_h j_p m_p | JM) (j_h' m_h' j_p' m_p' | JM) \langle g | a_h^+ a_p H a_p^+ a_h' | g \rangle A_{c'} = E A_c \quad (4.14)$$

A (4.11) kifejezést alkalmazva a Hamilton operátor mátrixeleme a (4.14) egyenletben a következő alakú:

$$\begin{aligned} \langle g | a_h^+ a_p H a_p^+ a_h' | g \rangle &= \sum_{ij} \langle i | T_1 | j \rangle \langle g | a_h^+ a_p a_i^+ a_j a_p^+ a_h' | g \rangle + \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{ijkl} \langle ij | V | kl \rangle \langle g | a_h^+ a_p a_j^+ a_i^+ a_k a_l a_p^+ a_h' | g \rangle. \end{aligned} \quad (4.15)$$

(4.6) és (4.7) összefüggések felhasználásával a (4.15) kifejezés kiszámítható:

$$\begin{aligned} \langle g | a_h^+ a_p H a_p^+ a_h' | g \rangle &= \{ \langle p \bar{h}' | V | \bar{h} p' \rangle - \langle p \bar{h}' | V | p' \bar{h} \rangle \} + \\ &+ \delta_{\bar{h} \bar{h}'} \left\{ \langle p | T_1 | p' \rangle + \sum_{i=1}^A (\langle pi | V | p' i \rangle - \langle pi | V | i p' \rangle) \right\} - \\ &- \delta_{pp'} \left\{ \langle \bar{h}' | T_1 | \bar{h} \rangle + \sum_{i=1}^A (\langle \bar{h}' i | V | \bar{h} i \rangle - \langle \bar{h}' i | V | i \bar{h} \rangle) \right\} + \\ &+ \delta_{pp'} \delta_{\bar{h} \bar{h}'} \left\{ \sum_{i=1}^A \langle i | T_1 | i \rangle + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^A (\langle ij | V | ij \rangle - \langle ij | V | ji \rangle) \right\}. \end{aligned} \quad (4.16)$$

A (4.16) kifejezés második tagja  $\varepsilon_p \delta_{pp'} \delta_{\bar{h} \bar{h}'}$ -ként írható, ugyanis a  $\Phi_q$  állapotok a (4.2)-ben definiált operátor saját függvényei és így

$$\varepsilon_q \delta_{qq'} = \langle q | T_1 | q' \rangle + \langle q | V_{sw} | q' \rangle, \quad (4.17)$$

a  $V_{sw}$  potenciállal pedig a Hartree—Fock számítás önkonzisztens potenciálját közelítettük, így mátrixelemeik közt a következő az összefüggés:

$$\langle q | V_{sw} | q' \rangle = \sum_{i=1}^A (\langle qi | V | q' i \rangle - \langle qi | V | i q' \rangle). \quad (4.18)$$

Ugyanezen okból a harmadik tag  $-\varepsilon_{\bar{h}} \delta_{pp'} \delta_{\bar{h} \bar{h}'}$  alakba írható, míg az utolsó tag  $E_g \delta_{pp'} \delta_{\bar{h} \bar{h}'}$ , ahol  $E_g$  az alapállapot energiája.

Ezen átalakításokkal a sajátértékegyenlet a következő egyszerű alakot veszi fel:

$$\begin{aligned} \sum_{c'} A_{c'} \sum_{\substack{m_p' m_h' \\ m_p m_h}} (-1)^{j_h - m_h + j_h' - m_h'} (j_h m_h j_p m_p | JM) (j_h' m_h' j_p' m_p' | JM) \times \\ \times \{ \langle p \bar{h}' | V | \bar{h} p' \rangle - \langle p \bar{h}' | V | p' \bar{h} \rangle \} = [(E - E_g) - (\varepsilon_p - \varepsilon_{\bar{h}})] A_c. \end{aligned} \quad (4.19)$$



### 4.3. A maradékkölcsönhatás mátrixelemei

A  $V(r_1, r_2)$  maradékkölcsönhatás általános esetben a Wigner, Bartlett, Majorana és Heisenberg erők összegeként írható fel

$$V(r_1, r_2) = V(|r_1 - r_2|)[W + BP_\sigma + MP_x + HP_\sigma P_x], \quad (4.20)$$

ahol  $P_\sigma$  és  $P_x$  a spin- és térkoordináta felcserélő operátorok. Az egyes erők paramétereire álljon fenn a

$$W + B + M + H = 1 \quad (4.20a)$$

feltétel. A számítások során a  $V(|r_1 - r_2|)$  potenciált multipól sorfejtésével célszerű figyelembe venni:

$$V(r_1, r_2) = \sum_{Qq} V_Q(r_1, r_2) Y_{Qq}^*(\hat{r}_2) Y_{Qq}(\hat{r}_1) [W + BP_\sigma - MP_\sigma P_\tau - HP_\tau], \quad (4.21)$$

ahol  $P_\tau$  az izospin felcserélő operátor. Itt felhasználtuk a  $P_\sigma P_x P_\tau = -1$  azonosságot.

A felcserélő operátorok konkrét reprezentációja a következő:

$$P_\sigma = 1/2 \cdot [1 + \underline{\sigma}_1 \cdot \underline{\sigma}_2],$$

$$P_\tau = 1/2 \cdot [1 + \underline{\tau}_1 \cdot \underline{\tau}_2],$$

ahol a  $\sigma$  és  $\tau$  komponensei a spin, illetve izospin térbeli Pauli mátrixok. A maradékkölcsönhatásnak ezt az alakját alkalmazva a mátrixelemekben szereplő integrálok és összegzések kiszámíthatók és így a (4.19) sajátértékegyenlet a következőképpen írható:

$$\sum_{c'} V_{cc'} A_{c'} = E_c A_c, \quad (4.22)$$

ahol

$$\begin{aligned} E_c &= (E - E_g) - (\varepsilon_p - \varepsilon_h) \quad \text{és} \\ V_{cc'} &= (4\pi)^{-1} i^{-l_p - l_h' + l_h + l_p'} \hat{j}_p \hat{j}_p' \hat{j}_h \hat{j}_h' \times \\ &\times \left\{ \left[ (W - H\delta_{\tau\tau'}) R_{cc'}^{JN} \frac{(-1)^{j_h + j_h' + 1}}{\hat{j}^2} \left( j_h \frac{1}{2} j_p - \frac{1}{2} |JO \right) \left( j_h' \frac{1}{2} j_p' - \frac{1}{2} |JO \right) \right] \times \right. \\ &\times \frac{1}{4} (1 + (-1)^{J + l_p + l_h}) (1 + (-1)^{J + l_p' + l_h'}) \Big] + \\ &+ [(B - M\delta_{\tau\tau'}) \sum_{PQ} R_{cc'}^{QN} (-1)^{l_p + l_p'} \hat{l}_p \hat{l}_p' \hat{l}_h \hat{l}_h' \hat{P}^2 (l_p O l_h O | QO) (l_p' O l_h' O | QO) \times \\ &\times \left\{ \begin{Bmatrix} l_p & l_h & Q \\ j_p & j_h & J \\ 1/2 & 1/2 & P \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} l_p' & l_h' & Q \\ j_p' & j_h' & J \\ 1/2 & 1/2 & P \end{Bmatrix} \right\} + \\ &+ [(H - W\delta_{\tau\tau'}) \sum_Q R_{cc'}^{QD} (-1)^{j_p + j_p' + J + Q} \left( j_p \frac{1}{2} j_p' - \frac{1}{2} |QO \right) \left( j_h \frac{1}{2} j_h' - \frac{1}{2} |QO \right) \times \\ &\times W(j_p j_h j_p' j_h' : QJ) \frac{1}{4} (1 + (-1)^{Q + l_p + l_p'}) (1 + (-1)^{Q + l_h + l_h'}) \Big] + \\ &+ [(M - B\delta_{\tau\tau'}) \sum_Q R_{cc'}^{QD} (-1)^{j_h + j_h' + J + Q + 1} \hat{l}_p \hat{l}_p' \hat{l}_h \hat{l}_h' (l_p O l_p' O | QO) (l_h O l_h' O | QO) \times \\ &\times W(l_p l_p' l_h l_h' : QJ) W\left(j_p j_p l_h j_h : \frac{1}{2} J\right) W\left(l_p' j_p' l_h' j_h' : \frac{1}{2} J\right) \Big] \Big\}. \end{aligned} \quad (4.23)$$



Ebben a kifejezésben az  $\hat{l}$  jelöléssel az  $\hat{l} = \sqrt{2I+1}$  mennyiséget jelöljük. Az  $R_{cc'}^{JN}$ ,  $R_{cc'}^{QN}$ ,  $R_{cc'}^{QD}$  mennyiségek a következő radiális integrálok:

$$R_{cc'}^{QN} = \int dr_1 dr_2 v_p(r_1) v_{\bar{h}}(r_2) V_Q(r_1, r_2) v_{\bar{h}}(r_1) v_{p'}(r_2), \quad (4.24)$$

$$R_{cc'}^{QD} = \int dr_1 dr_2 v_p(r_1) v_{\bar{h}}(r_2) V_Q(r_1, r_2) v_{p'}(r_1) v_{\bar{h}}(r_2). \quad (4.25)$$

A  $V(|r_1 - r_2|)$  kölcsönhatásra általában Yukawa vagy Gauss alakot szoktak feltételezni. Ezekben az esetekben a (4.21) sorfejtésben a  $V_Q(r_1, r_2)$  mennyiségek meghatározhatók és így a (4.24–4.25) radiális integrálokkal a  $V_{cc'}$  mátrixelemek meghatározhatók.

A számításokat azonban nagymértékben meggyorsítja, ha zérus hatótávolságúnak tételezzük fel a maradékkölcsönhatást. Ebben az esetben a Majorana-operátor  $P_x$  hatása ugyanaz mint a Wigner-erőé és így a Wigner-erővel együtt kezelhető, a  $P_\sigma P_x$  Heisenberg operátor pedig egy  $P_\sigma$  spinfelcserélő operátorra redukálódik. Így az ilyen maradékkölcsönhatást két paraméter határozza meg:

$$a = W + M, \quad (4.26)$$

$$b = B + H.$$

A (4.20a) feltételből következik, hogy  $a + b = 1$  és így a maradékkölcsönhatás

$$V(r_1, r_2) = -V_0 \delta(r_1 - r_2) [a + b P_\sigma] \quad (4.37)$$

alakban írható. Gyakran alkalmazzák a

$$V(r_1, r_2) = -V_0 \delta(r_1 - r_2) [\pi_t + p \pi_s] \quad (4.28)$$

alakot is, ahol

$$\pi_s = \frac{1}{4} (1 - \underline{\sigma}_1 \underline{\sigma}_2) = \frac{1}{2} (1 - P_\sigma) \quad (4.29)$$

a szingulett projekciós operátor és

$$\pi_t = \frac{1}{4} (3 + \underline{\sigma}_1 \underline{\sigma}_2) = \frac{1}{2} (1 + P_\sigma) \quad (4.30)$$

a triplett projekciós operátor. Az együtthatók közötti összefüggés

$$a = \frac{1}{2} (1 + p), \quad b = \frac{1}{2} (1 - p), \quad (4.31)$$

$$p = a - b, \quad (a + b = 1).$$

További egyszerűsödést jelent, hogy a (4.21) sorfejtésben a  $V_Q(r_1, r_2)$  mennyiségek zérus hatótávolságú kölcsönhatás esetén a  $Q$ -tól függetlenek:

$$V_Q(r_1, r_2) = -V_0 \delta(r_1 - r_2) \cdot r_1^{-2}. \quad (4.32)$$

Ezt figyelembe véve a (4.24–25) radiális integrálok is leegyszerűsödnek:

$$R_{cc'}^{QN} = R_{cc'}^{QD} = R_{cc'} = - \int dr \frac{V_0}{r^2} v_p(r) v_{\bar{h}}(r) v_{p'}(r) v_{\bar{h}}(r). \quad (4.33)$$



Mindezek az egyszerűsödések arra vezetnek, hogy a mátrixelem (4.23) kifejezésben levő  $P$ -re és  $Q$ -ra vonatkozó összegezés analitikusan elvégezhető. Az összegezés után kapjuk a zérus hatótávolságú maradékkölcsönhatás  ${}^{\delta}V_{cc'}$  mátrixelemeit, amelyekre a (4.22) egyenlet szintén érvényes, ha  $V_{cc'}$  helyett  ${}^{\delta}V_{cc'}$ -t írunk bele:

$${}^{\delta}V_{cc'} = \frac{1}{4\pi} i^{-l_p - l'_h + l_h + l'_p} \hat{j}_p \hat{j}'_p \hat{j}_h \hat{j}'_h \hat{J}^{-2} \Omega \cdot R_{cc'} \quad (4.34)$$

ahol

$$\begin{aligned} \Omega = & (-1)^{j_p + j'_p + 1} \left\{ \left( j_h - \frac{1}{2} j_p \frac{1}{2} |JO \right) \left( j'_h - \frac{1}{2} j'_p \frac{1}{2} |JO \right) \left[ (a - b\delta_{\tau\tau'}) + \frac{1}{2} (b - a\delta_{\tau\tau'}) \right] \cdot S_{\alpha} + \right. \\ & \left. + (-1)^{j_p + l_p + \frac{1}{2}} \left( j_h - \frac{1}{2} j_p - \frac{1}{2} |J-1 \right) (-1)^{j'_p + l'_p + \frac{1}{2}} \left( j'_h - \frac{1}{2} j'_p - \frac{1}{2} |J-1 \right) \frac{1}{2} (b - a\delta_{\tau\tau'}) S_{\beta} \right\}. \end{aligned} \quad (4.35)$$

$\Omega$  alkalmasabb alakját kapjuk, ha az „ $a, b$ ” paraméterek helyett a „ $p$ ” paramétert alkalmazzuk (4.28):

$$\begin{aligned} \Omega = & (-1)^{j_h + j'_h + 1} \cdot \frac{1}{2} \left\{ \begin{aligned} & p \left[ \left( j_p \frac{1}{2} j_h - \frac{1}{2} |JO \right) \left( j'_p \frac{1}{2} j'_h - \frac{1}{2} |JO \right) S_{\alpha} - (-1)^{j_h + l_h + j'_h + l'_h + 1} \times \right. \\ & \times \left. \left( j_p \frac{1}{2} j_h \frac{1}{2} |J1 \right) \left( j'_p \frac{1}{2} j'_h \frac{1}{2} |J1 \right) S_{\beta} \right] : \tau = \tau' \\ & \left( \frac{1}{2} p + \frac{3}{2} \right) \left( j_p \frac{1}{2} j_h - \frac{1}{2} |JO \right) \left( j'_p \frac{1}{2} j'_h - \frac{1}{2} |JO \right) S_{\alpha} - \left( \frac{1}{2} p - \frac{1}{2} \right) \times \\ & \times (-1)^{j_h + l_h + j'_h + l'_h + 1} \left( j_p \frac{1}{2} j_h \frac{1}{2} |J1 \right) \left( j'_p \frac{1}{2} j'_h \frac{1}{2} |J1 \right) S_{\beta} : \tau \neq \tau'. \end{aligned} \right. \end{aligned} \quad (4.36)$$

A (4.35–36) kifejezésekben fellépő  $S_{\alpha}$ ,  $S_{\beta}$  kifejezések a lyukrészcseke kvantumszámok megfelelő csatolását és így a spin és paritás megmaradását biztosítják:

$$\begin{aligned} S_{\alpha} &= \frac{1}{4} (1 + (-1)^{l_p + l_h + J}) (1 + (-1)^{l'_p + l'_h + J}), \\ S_{\beta} &= \frac{1}{2} (1 + (-1)^{l_p + l_h + l'_p + l'_h}). \end{aligned} \quad (4.37)$$

Így a (4.22) sajátérték egyenletből az  $E_c$  sajátértékek meghatározhatóak és kiszámítható minden sajátértékhez az  $A_c$  sajátvektor. Ezen  $A_c$  értékek meghatározzák (4.9) segítségével a különböző energiákhoz tartozó  $1p-1h$  sajátfüggvényeket,  $|\psi(JM)\rangle$ -t.



## 5. ELEKTROMÁGNESES ÁTMENETEK ÉS A GAMMA-ERŐSSÉGFÜGGVÉNY

### 5.1. Dipól átmeneti valószínűség

Első feladatunk az  $A$  nukleont tartalmazó atommag  $|\psi(JM)\rangle$  gerjesztett állapotából a  $|g\rangle$  alapállapotba való  $E1$  átmenet valószínűségének meghatározása. Az  $E1$  foton kibocsátását a leíró operátor a következő:

$$D(1, \nu) = \sum_{ij} e \langle i | D | j \rangle a_i^\dagger a_j, \quad (5.1)$$

ahol

$$\langle i | D | j \rangle = \int d^3r \Phi_i^*(r) \tau_3 r Y_{1\nu}(r) \Phi_j(r).$$

$\tau_3$  az izospin  $z$ -komponensének operátora:  $\tau_3 \chi_{it} = \tau_3 \chi_{it}$  és  $\nu$  a foton impulzusmomentumának  $z$ -komponense.

Ezen operátornak az előző fejezetben leírt  $|\psi(JM)\rangle$  lyukrészesecske gerjesztett állapot és az alapállapot közötti mátrixeleme meghatározható (I. I. Függelék):

$$Q_{1\nu}^E(JM, g) = \langle g | D(1, \nu) | \psi(JM) \rangle = \sum_c A_c \langle g | D(1, \nu) | \Phi_c(JM) \rangle = \sum_c A_c E_{1\nu}^{(c)}, \quad (5.2)$$

ahol

$$E_{1\nu}^{(c)} = -\frac{(e\tau)_{\text{eff}}}{\sqrt{4\pi}} (-1)^{j_p + \frac{1}{2}} i^{l_p - l_h} \frac{j_p j_h}{\sqrt{3}} \left( j_h - \frac{1}{2} j_p \frac{1}{2} |10\rangle \right) \times \\ \times \delta_{J1} \delta_{M\nu} \left[ \int dr v_h(r) r v_p(r) \right] \frac{1}{2} (1 + (-1)^{l_p + l_h + 1}). \quad (5.3)$$

Az  $(e\tau)_{\text{eff}}$  a nukleon effektív töltése az átmenetben [12]:

$$(e\tau)_{\text{eff}} = \begin{cases} e \left( 1 - \frac{Z}{A} \right) : \tau = +\frac{1}{2} \quad (\text{protonokra}) \\ -e \frac{Z}{A} : \tau = -\frac{1}{2} \quad (\text{neutronokra}) \end{cases} \quad (5.3a)$$

Az átmeneti valószínűség az impulzusmomentum-vetületek kezdeti állapot értékeire átlagolva és a végállapot értékeire összegezve meghatározható az (5.2) mátrixelem segítségével (I. I. Függelék):

$$T_{\psi(J) \rightarrow g}^{(E1)} = \frac{1}{\hbar} \frac{16\pi}{9(\hbar c)^3} E_\gamma^3 |Q_{10}^E(10, g)|^2 \delta_{J1}. \quad (5.4)$$

Ezt a mennyiséget a hagyományos Weisskopf-egységekben előnyös vizsgálni

$$T_{\psi(3) \rightarrow g[\text{W. U.}]}^{(E1)} = \frac{T_{\psi(J) \rightarrow g}^{(E1)}}{T_{\text{W.}}^{(E1)}} = \frac{64\pi}{9R^2 e^2} |Q_{10}^E(10, g)|^2 \delta_{J1}, \quad (5.5)$$

ahol  $R = r_0 A^{1/3}$ , az atommag sugara.



## 5.2. Az erősségfüggvény bevezetése

A 3. fejezet elméleti áttekintésének végén említettük, hogy a háttérállapotokra való szétterülést célszerű figyelembe venni. Az ott közölt számításokban végeredményként az (5.4.—5) átmeneti valószínűségeket adták meg a viszonylag kisszámú, 20—40  $1p-1h$  gerjesztett állapot és az alapállapot között.

Ezen állapotok közül általában nem lehetett egyet a pigmy rezonanciával azonosítani. A diszkrét energiaértékhez tartozó valószínűségekből pedig általános következtetéseket az erősség eloszlására vonatkozóan csak nehézkesen és pontatlanul lehetett megállapítani. Ez sugallta azt az ötletet, hogy a háttérállapotokra való szétterülést modellezzük és így a kísérleti eredményekkel összevethető erősségfüggvényt származtassuk. (Az erősségfüggvény bevezetésére vonatkozó elméleti és kísérleti munkáról a II. Függelékben írunk részletesen.)

A háttérállapotokra való szétterülés modellezésekor két szempontot vettünk figyelembe:

a) Az  $1p-1h$  gerjesztésekben fellépő dipól erősség (a dipól mátrixelemek négyzetének energiával súlyozatlan összege) oszoljon szét a bonyolultabb struktúrájú háttérállapotokra. A számításokban ugyan a dipól mátrixelemek négyzetének összege kisebbnek adódott, mint amit az összszabály meghatároz, de nem vezettünk be külön normálást az összszabály kielégítésére.

b) A származtatott erősségfüggvény tartsa meg a sajátenergiákban és a hozzájuk tartozó átmeneti valószínűségekből levő információt, azaz egy  $E=E_i$  energiához tartozó dipól átmeneti erősség, az  $E_i$ -hez közeli  $E_\lambda$  energiájú háttérállapotokra legyen szétosztva.

A két alapelv lerögzítése után szabadon választhatunk, hogy milyen típusú elosztással modellezzük a  $1p-1h$  állapot erősségének szétterülését. Erre többféle módszer lehetséges, a függelékben bemutatunk néhány példát és a harmadik fejezetben említettük, hogy az eloszlás általában állapotfüggő, így például a küszöbhez közeli állapotok szétterülése a háttérállapotokra a többi állapottól jelentősen eltérhet.

Az első alapelv szerint azonban minden  $1p-1h$  gerjesztés szétterülését leíró eloszlásnak úgy kell lennie normálva, hogy az eloszlott teljes erősség egyezzen meg a  $1p-1h$  gerjesztés alapállapotra való bomlásának dipól erősségével.

Mindezek figyelembevételével igyekeztünk egyszerű megoldást találni és ezért minden  $\psi(J)$ ,  $1p-1h$  állapot szétoszlását azonos szórású, megfelelően normált Gauss-eloszlással írtuk le. (Ezzel persze a küszöbállapotok eltérő szétterülését nem vettük figyelembe.)

Az előbbi rövid bevezetésben leírt elveket a következőképpen valósítottuk meg. Az erősségfüggvény definíciója:

$$f_{E1}(E_\gamma) = E_\gamma^{-3} \langle \Gamma_{\gamma, \lambda \rightarrow g}^{(E1)} \rangle_{av} \cdot \varrho_J(E_\lambda) = \hbar E_\gamma^{-3} \langle T_{\lambda \rightarrow g}^{(E1)} \rangle_{av} \varrho_J(E_\lambda), \quad (5.6)$$

ahol  $\varrho_J(E_\lambda)$  a kezdeti állapot  $E_\lambda$  energiájának környezetében a  $\psi(J)$ -vel azonos spinű és paritású állapotok sűrűsége. A  $\langle T_{\lambda \rightarrow g}^{(E1)} \rangle_{av}$ , az átmeneti valószínűségek, a  $\langle \Gamma_{\gamma, \lambda \rightarrow g}^{(E1)} \rangle_{av}$ , a sugárzási szélességek ezen állapotokra képzett átlaga  $E_\lambda$  körül. Itt az egyszerűség kedvéért az alapállapotot tekintjük végállapotnak (a kérdést részletesebben a II. Függelék tárgyalja).

Tehát feltételezésünk szerint egy  $1p-1h$  állapot erőssége Gauss-eloszlással



oszlik szét a háttérállapotokra:

$$\langle T_{\lambda \rightarrow g}^{(E1)}(E_\lambda) \rangle_{\text{av.}} Q_J(E_\lambda) = T_{\psi(J) \rightarrow g}^{(E1)}(E_i) \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma}} \exp \left[ -\frac{(E_i - E_\lambda)^2}{2\sigma^2} \right]. \quad (5.7)$$

Ez a formula tükrözi, hogy ha a háttérállapotok sűrűbben helyezkednek el egy háttérállapotra átlagosan kevesebb dipól átmeneti erősség jut, és hogy egy  $1p-1h$  gerjesztésből a környező energiákon levő háttérállapotokra pontosan a benne képviselt erősség oszlik el. Az eredő erősségfüggvény ezen tagok összegeként áll elő:

$$f_{E1}(E_\gamma) = \hbar E_\gamma^{-3} \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma}} \sum_i T_{\psi(J) \rightarrow g}^{(E1)}(E_i) \exp \left[ -\frac{(E_i - E_\lambda)^2}{2\sigma^2} \right], \quad (5.8)$$

$$E_\lambda = E_g + E_\gamma,$$

ahol a  $\sigma$  szórási paraméter a diagonalizálás során kapott lyukrészesecske sajátállapotok átlagos szinttávolságával egyenlő,  $\sigma = 0,4-0,5$  MeV.

Az ilyen módon képzett erősségfüggvény a *b)* pontnak eleget tesz. Vizsgáljuk meg az összszabszabályt:

$$\int_0^\infty f_{E1}(E_\gamma) dE_\gamma = \frac{16\pi}{9(\hbar c)^3} \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma}} \sum_i \left\{ |Q_{1,0}^E(1, 0(E_i); g)|^2 \cdot \int_0^\infty \exp \left[ -\frac{|E_\gamma - (E_i - E_g)|^2}{2\sigma^2} \right] dE_\gamma \right\}. \quad (5.9)$$

Elvégezve az  $y = E_\gamma - (E_i - E_g)$  helyettesítést, az összegben levő összes integrálban a Gauss-eloszlás várható értéke az  $y=0$  pontba kerül.

Mivel az integrálás alsó határa  $a = -(E_i - E_g)$  körülbelül  $-(6-8)$  MeV értékű, ami a tízszeres szórásnál nagyobb, nem követünk el számottevő hibát, ha az integrálokat  $-\infty$ -ig kiterjesztjük:

$$\begin{aligned} \int_0^\infty f_{E1}(E_\gamma) dE_\gamma &\cong \frac{16\pi}{9(\hbar c)^3} \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma}} \sum_i \{ |Q_{1,0}^E(1, 0(E_i); g)|^2 \} \int_{-\infty}^\infty e^{-y^2/2\sigma^2} dy = \\ &= \frac{16\pi}{9(\hbar c)^3} \sum_i |Q_{1,0}^E(1, 0(E_i); g)|^2. \end{aligned} \quad (5.10)$$

Az eredményből látható, hogy az *a)* pontban említett szempontnak az így kapott erősségfüggvény eleget tesz, az összszabszabályt ugyanis kielégíti, mégpedig olyan mértékben, ahogyan a héjmodell számítás mátrixelemei.

Az erősségfüggvény származtatásával kapcsolatos más problémákat még a függelék tárgyal. Szintén itt találhatók az erősségfüggvényre, az átmeneti valószínűségekre, a fotoabszorpciós hatáskeresztmetszetre és a gamma-spektráeloszlásra valamint ezek összefüggésére vonatkozó kifejezések, amelyek igen fontosak a kísérleti eredményekkel való összevetéshez.

Az elméleti következtetések szempontjából azonban fontosabb néhány más segédmenyiség definiálása. Így a fejezet végén röviden ezeket ismertetjük.



### 5.3. A lecsatolódás és a kollektivitás vizsgálata

Az elméleti bevezető részben (3. fejezet) említettük, hogy egyes héjmodell számításokban azt találták, hogy bizonyos állapotok a  $\{|\Phi_c\rangle\}$  bázisból nem járulnak hozzá az óriásrezonanciát reprezentáló lyukrészcseke sajátállapotokhoz, azaz ezen bázisállapotok

$$A_c(E_i) = \langle \Phi_c(JM) | \psi(JM)_{E_i} \rangle = \langle \Phi_c | E_i \rangle \quad (5.11)$$

amplitúdója az óriásrezonanciát reprezentáló állapotban vagy állapotokban  $|\langle \Phi_c | E_{GDR} \rangle| \ll 1$ . Az amplitúdók összehasonlításával lehetett a 3. fejezetben említett következtetéseket levonni.

Sokat segít ilyen vizsgálatokban a segédmenntényiségek bevezetése. Vezessünk be néhány egyszerűsítő jelölést és írjuk fel velük az átmeneti valószínűség (5.2)(5.4) kifejezésekben definiált alakját:

$$T_{\psi(J) \rightarrow g}^{(E1)}(E_i) = C' E_\gamma^3 \left| \sum_c i_{t_c} \right|^2, \quad (5.12)$$

ahol

$$C' = \frac{1}{\hbar} \frac{16\pi}{9(\hbar c)^3}$$

és

$$i_{t_c} = \langle g | D(1, \nu) | \Phi_c(JM) \rangle \langle \Phi_c(JM) | E_i \rangle = A_c(E_i) \cdot E_{1\nu}^{(c)}.$$

Az összegzés a teljes  $\{|\Phi_c(JM)\rangle\}$  bázisra vonatkozik. Ahhoz, hogy megvizsgáljuk, hogy a bázis egy-egy  $S$  részhalmaza mennyiben járul hozzá az  $|E_i\rangle$  lyukrészcseke sajátállapot alapállapotra történő dipól átmeneti valószínűségéhez, bevezethetjük a

$$T_{\psi(J) \rightarrow g}^{*(E1)}(E_i) = C' E_\gamma^3 \left| \sum_{c \in S} i_{t_c} \right|^2 \quad (5.13)$$

parciális átmeneti valószínűségeket. Ennek kifejezésében az összegzés csak az  $S$  részhalmazon fut végig. Lényegesen egyszerűsíti a vizsgálatot, ha (5.8) alapján a parciális átmeneti valószínűségekből is erősségfüggvényt származtatunk, amely az  $S$  részhalmaz által hordozott dipól-erősség eloszlását mutatja:

$$f_{E1}^{*S}(E_\gamma) = \hbar E_\gamma^{-3} \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma}} \sum_i T_{\psi(J) \rightarrow g}^{*(E1)}(E_i) \exp \left[ -\frac{(E_i - E_\lambda)^2}{2\sigma^2} \right], \quad (5.14)$$

$$E_\lambda = E_g + E_\gamma.$$

Már az  $f_{E1}^{*S}(E_\gamma)$  erősségfüggvény bevezetésével kapott eredmények azt mutatják, hogy a bázisállapotok járuléka kollektíven adódnak össze [10] az anomália energiatartományában. Ezért a kollektivitás kvantitatív jellemzésére egy újabb segédmenntényiséget vezettünk be [36]. A

$$T_{\psi(J) \rightarrow g}^{\text{coll.}}(E_i) = C' E_\gamma^3 \left\{ \left| \sum_{c \in S} i_{t_c} \right|^2 - \sum_{c \in S} |i_{t_c}|^2 \right\} = C' E_\gamma^3 \sum_{\substack{b, c \in S \\ b \neq c}} i_{t_b} i_{t_c} \quad (5.15)$$



„átmeneti valószínűségből” az előbbieken leírt indokok alapján erősségfüggvényt származtattunk:

$$f_{E\lambda}^{\text{coll.}}(E_\gamma) = \hbar E_\gamma^{-3} \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma}} \sum_i T_{\psi(J) \rightarrow g}^{\text{coll.}}(E_i) \exp \left[ -\frac{(E_i - E_\lambda)^2}{2\sigma^2} \right], \quad (5.16)$$

$$E_\lambda = E_g + E_\gamma.$$

Az így nyert erősségfüggvény konstruktív interferencia esetén pozitív értéket vesz fel, míg destruktív interferencia esetén negatív, segítségével tehát eldönthető, hogy a bázis, illetve egy részhalmaza az egyes energiatartományokban milyen mértekű kollektivitást mutat.

Az erősségfüggvény és ezen két segédmenyiség bevezetése nagymértékben megkönnyítette a nagymennyiségű számítási adat feldolgozását és áttekinthető, szemléletes képet nyújt az eredményekről.

## 6. EREDMÉNYEK, ÖSSZEFOGLALÁS

A küszöbállapotok hatásának vizsgálatára végzett héjmodell számítás első lépéseként, a 4.1 pontban részletesen leírt módon, meghatároztuk az egyrészecske állapotok hullámfüggvényeit és energiáit. A küszöbállapotok hatásának kimutatására több tömegszámparaméterrel végeztünk számításokat, amelyek a küszöbhez közelebbi, illetve távolabbi egyrészecske energiákat adtak. Az egyrészecske energiák változását mutatja az 5. táblázat az  $^{116}\text{Sn}$  konfigurációnak azon egyrészecske állapotaira, amelyeket a 4. táblázatban közölt lyukrészecske-bázis tartalmaz.

## 5. TÁBLÁZAT

Egyrészecske kötési energiák Saxon–Woods potenciálban, különböző  $A$  tömegparaméterek esetén, ([MeV] egységekben)

$A=116$		120	124	126	132
1f 5/2	– 18,38	– 18,98	– 19,46	– 19,97	– 20,45
2p 3/2	– 17,71	– 18,18	– 18,65	– 19,09	– 19,51
2p 1/2	– 16,44	– 16,95	– 17,45	– 17,92	– 18,37
1g 9/2	– 14,14	– 14,69	– 15,21	– 15,72	– 16,21
2d 5/2	– 9,72	– 10,26	– 10,78	– 11,29	– 11,78
1g 7/2	– 9,20	– 9,90	– 10,56	– 11,20	– 11,81
3s 1/2	– 7,87	– 8,39	– 8,90	– 9,39	– 9,87
2d 3/2	– 7,43	– 8,01	– 8,57	– 9,12	– 9,65
1h 11/2	– 6,28	– 6,93	– 7,55	– 8,14	– 8,72
2f 7/2	– 2,09	– 2,64	– 3,17	– 3,69	– 4,20
3p 3/2	– 1,01	– 1,39	– 1,78	– 2,18	– 2,59
3p 1/2	– 0,28	– 0,58	– 0,92	– 1,28	– 1,63
1f 7/2	– 15,33	– 15,95	– 16,55	– 17,12	– 17,67
1f 5/2	– 12,13	– 12,86	– 13,56	– 14,23	– 14,86
2p 3/2	– 10,83	– 11,48	– 12,11	– 12,71	– 13,29
2p 1/2	– 9,59	– 10,28	– 10,94	– 11,57	– 12,18
2d 5/2	– 2,71	– 3,43	– 4,12	– 4,79	– 5,43
1g 7/2	– 2,91	– 3,78	– 4,62	– 5,43	– 6,20
3s 1/2	– 0,60	– 1,29	– 1,97	– 2,63	– 3,27
2d 3/2	– 0,43	– 1,19	– 1,93	– 2,65	– 3,34



Az 5. táblázatból látható, hogy a küszöbhez közeli alacsony impulzummomentumú neutron egyrészecske állapotok energiájának változása az  $A$  tömegszámparaméter változása az  $A$  tömegparaméter változására kisebb mérvű mint a többi állapoté. Ezt a viselkedést a 7. ábrán is megfigyelhetjük. A  $3p_{1/2}$ ,  $3p_{3/2}$  és  $2f_{7/2}$  neutron-egyrészecske állapotok ezen eltérő viselkedése megmutatkozik a  $\varepsilon_{p\hbar} = \varepsilon_p - \varepsilon_{p\hbar}$  lyukrészecske energiákban is ( $E_c = (E - E_g) - (\varepsilon_p - \varepsilon_{p\hbar}) = (E - E_g) - \varepsilon_{p\hbar}$ ). (6. táblázat.)

6. TÁBLÁZAT

Az $\varepsilon_{p\hbar}$ lyukrészecske energiák különböző $A$ tömegparaméterek esetén, ([MeV] egységekben)					
$c$	$A=116$	$A=120$	$A=124$	$A=128$	$A=132$
1	7,59	7,81	7,99	8,11	8,22
2	6,85	7,00	7,12	7,21	7,28
3	8,71	8,87	9,00	9,10	9,19
4	7,11	7,26	7,40	7,51	7,61
5	7,63	7,62	7,61	7,60	7,57
6	12,06	12,05	12,05	12,03	12,00
7	7,85	7,76	7,67	7,58	7,45
8	9,01	8,95	8,87	8,80	8,72
9	10,29	10,18	10,07	9,97	9,86
10	10,95	10,92	10,89	10,85	10,80
11	9,15	9,08	9,01	8,93	8,85
12	8,99	8,98	8,97	8,95	8,92
13	10,39	10,29	10,18	10,07	9,95
14	10,23	10,19	10,14	10,08	10,03
15	8,12	8,06	7,99	7,93	7,86
16	11,70	11,66	11,63	11,58	11,53
17	9,22	9,07	8,93	8,80	8,67
18	9,42	9,43	9,44	9,44	9,43
19	12,42	12,17	11,93	11,69	11,47
20	12,62	12,52	12,43	12,33	12,23

Az első öt lyukrészecske állapot viselkedése eltér a többitől, ezen állapotok  $\varepsilon_{p\hbar}$  energiája az  $A$  tömegszámparaméter növelésével növekszik vagy közel állandó, míg a többi esetében  $\varepsilon_{p\hbar}$  csökkenő tendenciát mutat. Az első öt lyukrészecske állapotban a részecske komponensek a neutron  $3p_{1/2}$ ,  $3p_{3/2}$  és  $2f_{7/2}$  egyrészecske állapotok. Ez a megfigyelés a későbbiek szempontjából fontos, ugyanis ennek lesz a következménye az anomális csúcs és az óriásrezonancia energiáinak eltérő változása az  $A$  tömegszámparaméter változásának hatására.

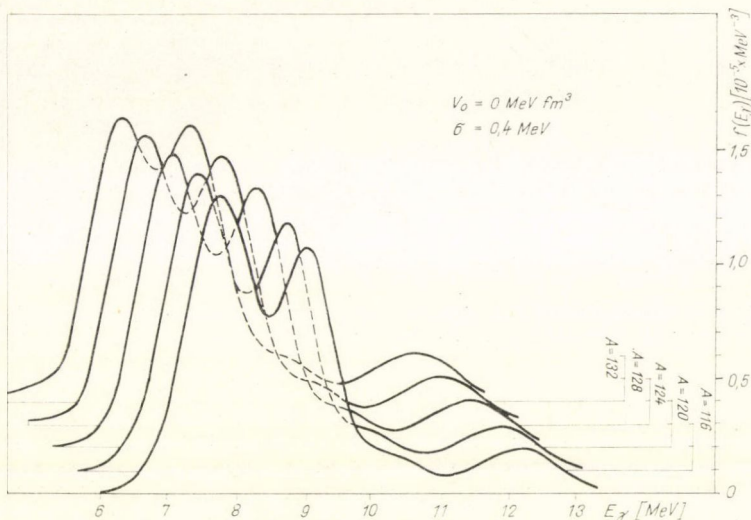
A bázisállapotok meghatározásával egyidejűleg a  $\langle g | D(1, \nu) | \Phi_c(JM) \rangle$  dipól átmeneti mátrixelemeket is meghatároztuk. Szintén érdekes a továbbiak szempontjából, hogy ezen a perturbálatlan (a maradékkölcsönhatással való diagonalizálás előtti) lyukrészecske rendszeren a dipól átmeneti erősség hogyan oszlik el. Az egyes mátrixelemek azonban kevésbé alkalmasak a későbbi eredményekkel való összehasonlításra, ezért már ezekből is az 5.2 és 5.3 pontban leírt módon „perturbálatlan” erősségfüggvényt származtattunk. Ebben az esetben azonban a számítás valamelyest egyszerűbb:

$$f_{E1,0}(E_\gamma) = \frac{\hbar C'}{\sqrt{2\pi\sigma}} \sum_c |\langle g | D(1, 0) | \Phi_c(J0) \rangle|^2 \exp \left[ -\frac{(\varepsilon_{p\hbar} - E_\gamma)^2}{2\sigma^2} \right]. \quad (6.1)$$

Az így kapott erősségfüggvények azt mutatták, hogy a dipól átmeneti erősség zöme a 6—10 MeV energiatartományba esik. Ebben a tartományban a bázisállapo-



tok elegendően sűrűn helyezkednek el. Nagyobb energiákon a dipól átmeneti erősség lényegesen kevesebb, ez főleg a kis számú bázisállapotnak tulajdonítható. A bázis korlátozottsága így főleg magasabb energiákon érvényesül és így a későbbi erősségfüggvények ebben a tartományban kevésbé tekinthetők pontosnak. A tömegszámparaméter változtatásával ezek a tulajdonságok nem változnak és az erősségfüggvényben nem lép fel jelentős változás. (8. ábra.)



8. ábra. Az  $f_{E1,0}(E_\gamma)$  „perturbálatlan” erősségfüggvények különböző  $A$  tömegparaméterek esetén

A diagonalizálás során a következő formájú maradékkölcsönhatást használtuk:

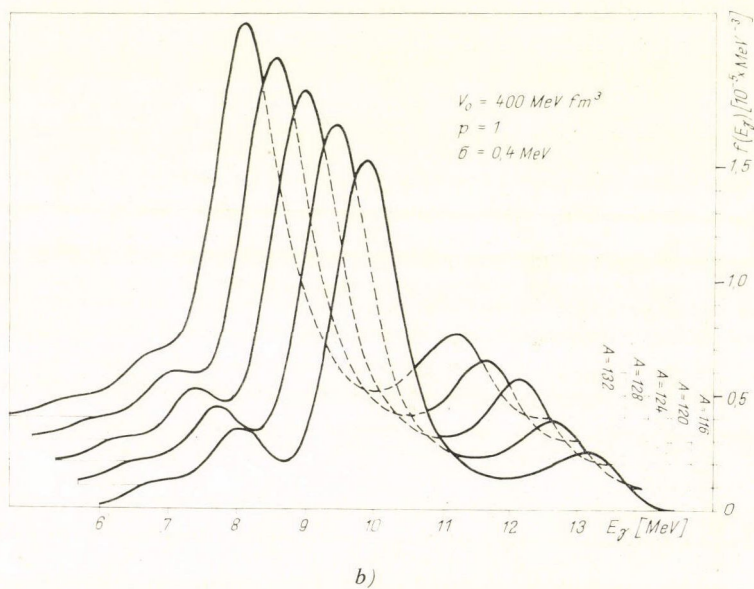
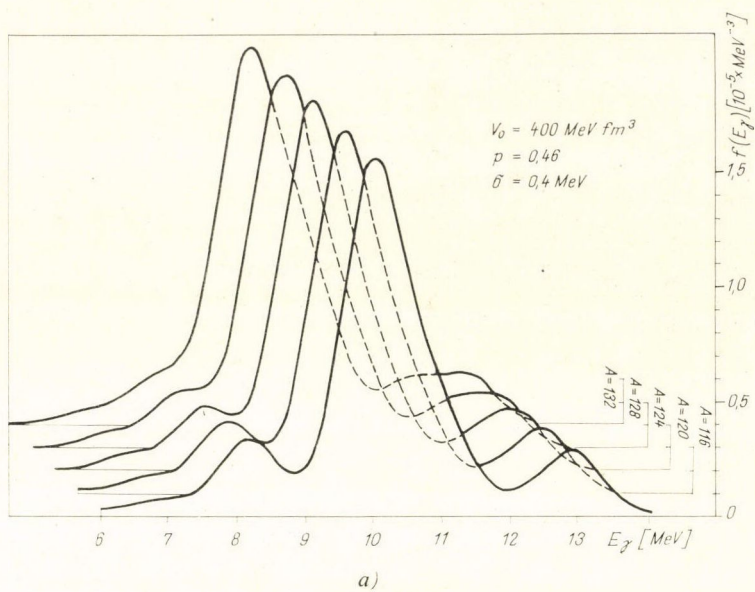
$$V(r_1, r_2) = -V_0 \delta(r_1 - r_2) (\pi_t + p\pi_s), \quad (6.2)$$

ahol  $\pi_s$  és  $\pi_t$  a szingulett és triplett projekciós operátorok. Az irodalomban található paraméterértékekből [7–9] négy viszonylag szélsőséges értéket választottunk azért, hogy az anomália esetleges érzékenységet a maradékkölcsönhatás választására megállapítsuk:

1.  $V_0 = 400 \text{ MeV fm}^3$ ,  $p = 0,46$
2.  $V_0 = 400 \text{ MeV fm}^3$ ,  $p = 1$
3.  $V_0 = 850 \text{ MeV fm}^3$ ,  $p = 0,46$
4.  $V_0 = 850 \text{ MeV fm}^3$ ,  $p = 1$

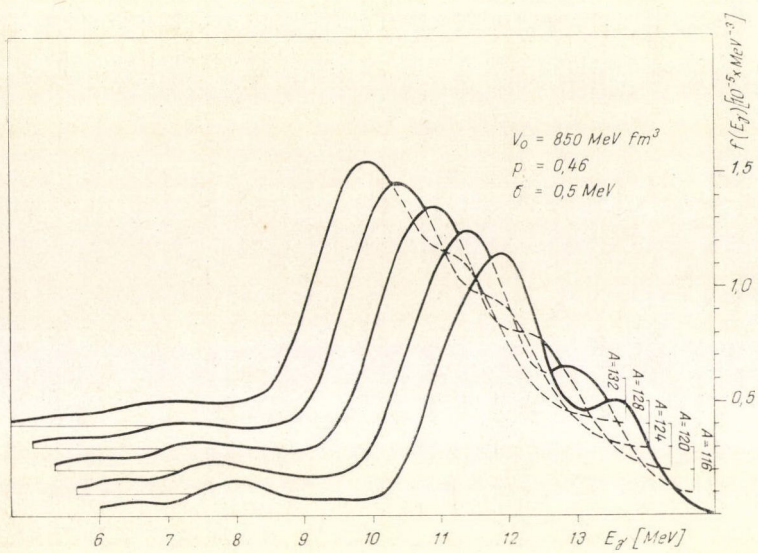
Minden egyes maradékkölcsönhatással és mind az öt tömegszámparaméterrel elvégeztük a diagonalizálást, és megkaptuk a sajátenergiákat, valamint a hozzájuk tartozó alapállapotú dipól átmeneti valószínűségeket. Az egyik számítás eredményét példaként részletes táblázatban mutatjuk be. Az  $A=116$ ,  $V_0=400 \text{ MeV fm}^3$ ,  $p=0,46$  esetben az  $E_i$  sajátenergiákat a hozzájuk tartozó  $T_{\psi(J) \rightarrow g[\text{W.U.}]}^{(E1)}$  átmeneti



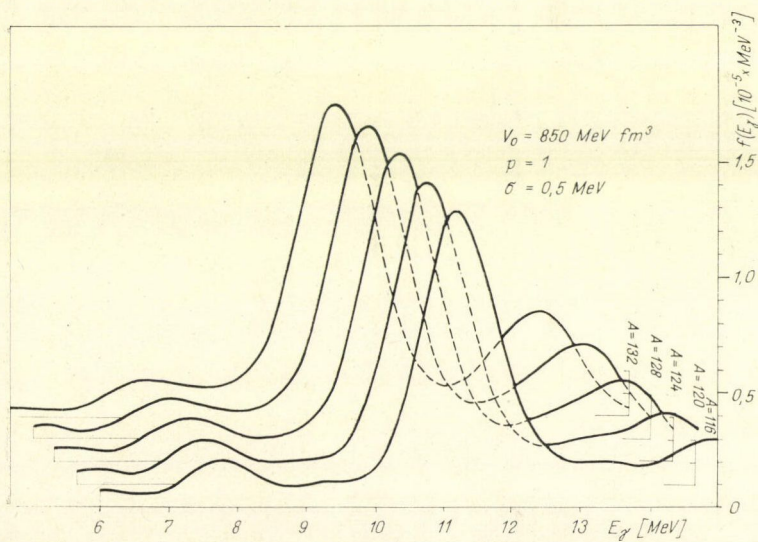


9. ábra. Az  $f_{E1}(E_\gamma)$  erősségfüggvények különböző tömegszámparaméterek és maradékkölcsönhatások esetén





c)



d)

9. ábra



valószínűségeket is az első öt bázisállapothoz tartozó  $\langle \Phi_c | E_i \rangle$  amplitúdókat a 7. táblázat tartalmazza.

### 7. TÁBLÁZAT

A  $^{116}\text{Sn}$   $1^-$  spinű és paritású lyukrészcseke gerjesztett állapotainak sajátenergiái, alapállapotú átmeneti valószínűségei és néhány neutron bázisállapot amplitúdója a sajátállapotokban. ( $V=400 \text{ MeV fm}^3$ ,  $p=0,46$ )

$E_i$ [MeV]	$\begin{matrix} (E1) \\ T(E_i) \end{matrix}$ [W. U.]	$\begin{matrix} 3p_{1/2}^- \\ 3s_{1/2}^- \end{matrix}$	$\begin{matrix} 3p_{3/2}^- \\ 3s_{1/2}^- \end{matrix}$	$\begin{matrix} \langle \Phi_c   \\ 2f_{7/2}^- \\ 1g_{7/2}^- \end{matrix}$	$\begin{matrix} 3p_{3/2}^- \\ 2d_{5/2}^- \end{matrix}$	$\begin{matrix} 2f_{7/2}^- \\ 2d_{5/2}^- \end{matrix}$
5,75	0,060	0,106	0,230	0,006	-0,050	0,487
6,76	0,005	0,129	0,932	0,009	-0,043	-0,143
7,24	0,040	0,005	-0,077	0,840	-0,086	0,277
7,26	0,026	-0,013	-0,087	-0,539	-0,109	0,472
7,63	0,027	0,977	-0,172	-0,016	-0,023	-0,064
8,20	0,588	0,078	0,135	0,020	0,531	0,532
8,75	0,009	-0,028	0,005	-0,009	-0,736	0,244
8,90	0,009	-0,010	-0,012	-0,007	0,177	-0,073
9,12	0,040	-0,061	-0,103	-0,014	0,182	0,085
9,38	0,176	0,011	0,012	-0,027	-0,220	-0,032
9,56	0,000	-0,005	-0,009	-0,041	0,078	-0,094
9,93	2,180	-0,042	-0,056	-0,014	0,103	-0,226
10,30	0,674	0,061	0,051	-0,005	-0,123	-0,125
10,36	0,131	0,001	-0,007	-0,001	0,027	-0,019
10,48	0,161	-0,000	0,011	-0,007	0,035	0,004
10,97	0,723	0,032	0,009	-0,000	-0,067	0,049
11,72	0,067	0,000	0,000	-0,043	0,018	-0,046
12,10	0,087	0,001	0,004	0,007	-0,004	0,028
12,85	0,260	0,009	0,002	-0,008	0,010	0,002
13,0	0,265	-0,006	-0,004	0,004	0,019	-0,042

A 7. táblázatban bemutatott esetben az óriásrezonanciát a 9,93 MeV és a 10,80 MeV energiájú állapotok reprezentálják, ezekben összpontosul az összes dipól átmeneti erősség 51 %-a. 9 MeV alatt jelenik meg az erősség 14 %-a és 11 %-ot ebből egyetlen állapot képvisel 8,2 MeV energiánál. A külön felsorolt öt lyukrészcseke állapot leginkább az alacsony energiás tartományban jelenik meg, és csak elenyésző részben járul az óriásrezonanciához.

A 9. ábrán jól látható, hogy a maradékkölcsönhatás bevezetése a dipól átmeneti erősséget magasabb energiák felé tolta el és az erősségfüggvények nagymértékben megváltoztak a „perturbálatlan” erősségfüggvényhez képest (8. ábra.) Az óriásrezonanciának megfelelő csúcs a  $V_0=400 \text{ MeV fm}^3$  erősségű maradékkölcsönhatások esetén  $A=116$  tömegszámánál 10–11 MeV energiára esik, míg  $V_0=850 \text{ MeV fm}^3$  esetén 11–12 MeV körüli energiákra. Az  $A$  tömegszámparaméter növekedésével az óriásrezonanciának megfelelő csúcsok minden esetben alacsonyabb energiák felé tolódnak el, és az eltolódás a tömegparaméter 116-ról 132-re való növelése esetén meghaladja a 0,5 MeV-et.

Az  $A=116$  tömegparaméter esetében mindegyik maradékkölcsönhatás egy lecsatolódnak eredményez, és egy anomális csúcs jelenik meg  $\sim 8 \text{ MeV}$  energiánál. Az anomális csúcs körüli tartományban 6,5–8,5 MeV között az erősségfüggvények hasonlóak egymáshoz, sőt a 2. fejezetben leírt kísérleti eredményekkel is jó egyezést mutatnak. Az, hogy a tömegparaméter növekedésével az anomális csúcs a



legtöbb esetben eltűnik és minden esetben csökken, arra utal, hogy megjelenését a küszöbállapotok okozzák és ezen állapotok eltávolodása a küszöbtől az anomáliát csökkenti.

Az anomália eltűnésének két lényegesebb tényezője van. Az egyik az anomális csúcs csökkenése, a másik az, hogy az anomális csúcs energiája a növekvő tömegszámmal magasabb energiák felé tolódik el, ellentétben az óriásrezonanciával. Ez utóbbit jól megfigyelhető a  $V_0 = 400 \text{ MeV fm}^3$  erősségű maradékkölcsönhatások esetén, ahol az óriásrezonancia és az anomális csúcs oly mértékben közelednek egymáshoz, hogy az anomália majdnem beleolvad az óriásrezonancia alacsony energiájú oldalába. (10b ábra.)

Azt, hogy az anomália tartományában mely bázisállapotok erőssége jelenik meg, a 7. táblázattal kapcsolatban már érintettük, arról azonban, hogy ezek milyen mértékben felelősek az anomália kialakulásáért, az 5. fejezetben leírt parciális erősségfüggvények pontosabb képet adnak. Először több  $S_i$  részhalmazt kiválasztottunk a bázisból:

$$S_a = S_b \cup S_c,$$

$$S_b = \{3p_{1/2}, 3s_{1/2}^{-1}; 2f_{7/2}, 1g_{7/2}^{-1}; 2f_{7/2}, 2d_{5/2}^{-1}\},$$

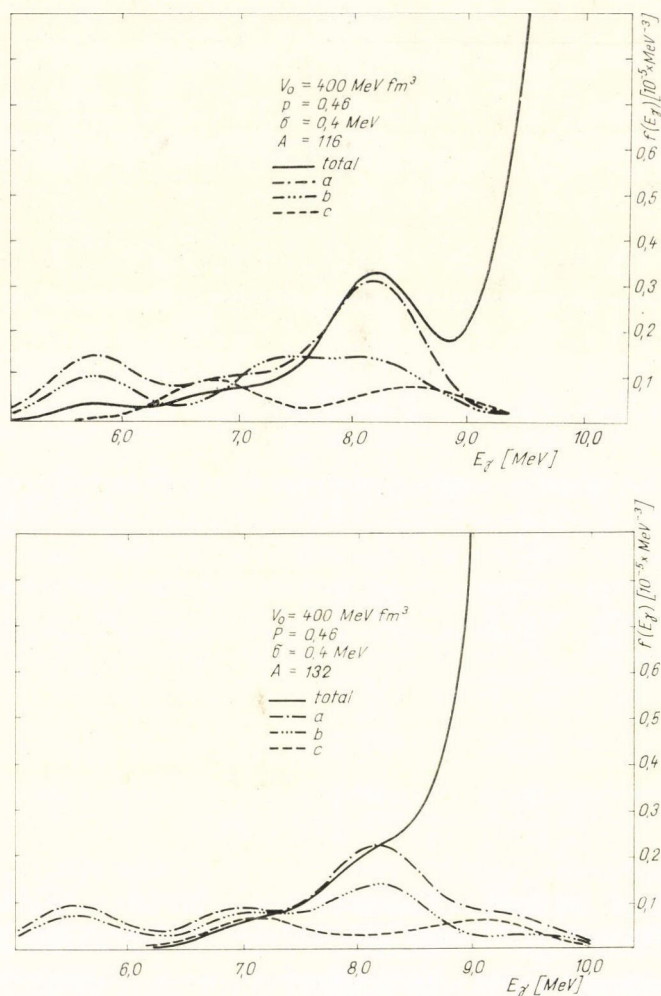
$$S_c = \{3p_{3/2}, 3s_{1/2}^{-1}; 3p_{3/2}, 2d_{5/2}^{-1}\},$$

majd az ezen részhalmazok járulékát ábráztuk a hozzájuk tartozó „parciális” erősségfüggvények segítségével az anomális tartományban. Már az előzetes számítások [10] is azt mutatták, hogy az anomális csúcs tartományban a küszöbállapotok egy kollektív csúcsot eredményeznek, míg az alacsonyabb energián ( $\sim 7,5 \text{ MeV}$ ) fellépő karakterisztikus csökkenés ezen állapotok destruktív interferenciájának tudható be. A jelenlegi kibővített számításokban [36] szintén megfigyelhető, hogy az összes küszöbállapotot tartalmazó  $S_a$  részhalmaz parciális erősségfüggvénye  $6,5\text{--}8,5 \text{ MeV}$  között nagyon jól közelíti a teljes erősségfüggvényt, azaz ebben a tartományban a többi állapotok csak kismértékben járulnak hozzá az erősséghez.  $9 \text{ MeV}$  felett viszont a küszöbállapotok járuléka hanyagolható el. Az  $S_a$ ,  $S_b$  és  $S_c$  részhalmazokhoz tartozó parciális erősségfüggvények összehasonlításából feltételezhetjük, hogy a küszöbállapotok az  $5\text{--}9 \text{ MeV}$  tartomány egyes részein konstruktívan, más részein destruktívan interferálnak (10. ábra).

A kollektivitás pontosabb vizsgálatára bevezettünk egy  $f_{(E_\gamma)}^{\text{coll.}}$  erősségfüggvényt (5. fejezet), amely konstruktív interferencia esetén pozitív értéket vesz fel, destruktív interferencia esetén pedig negatív.

Ennek az  $f_{(E_\gamma)}^{\text{coll.}}$  erősségfüggvénynek segítségével vizsgáltuk meg azt, hogy a küszöbállapotok, azaz az  $S_a$  részhalmaz önmagában mely tartományokban szuperporálódik konstruktívan, és mely tartományokban destruktív. A kezdeti feltételezéseket ez a vizsgálat igazolta az anomális csúcs tartományában ( $E_\gamma \approx 8 \text{ MeV}$ ) a küszöbállapotok nagymértékű kollektivitást mutatnak és az  $f_{(E_\gamma)}^{\text{coll.}}$  hozzávetőlegesen az  $f^*(E_\gamma)$  38%-át teszi ki, a csúcs energiájánál.  $A \sim 7,8 \text{ MeV}$  körül fellépő gyors emelkedés az erősségfüggvényben annak tudható be, hogy  $6,8\text{--}7,5 \text{ MeV}$  között az interferencia destruktív és  $7,5\text{--}8,5 \text{ MeV}$  tartományban hirtelen konstruktívvá válik. Az anomália karakterisztikus tulajdonsága — tehát, hogy alacsonyabb energiákon egy erősséghiány, míg magasabb energiákon egy erősség többlet lép fel — számításaink szerint attól van, hogy a küszöbállapotok destruktív, illetve konstruktív interferenciát mutatnak különböző energiákon. Az alacsonyabb energián mutatózó



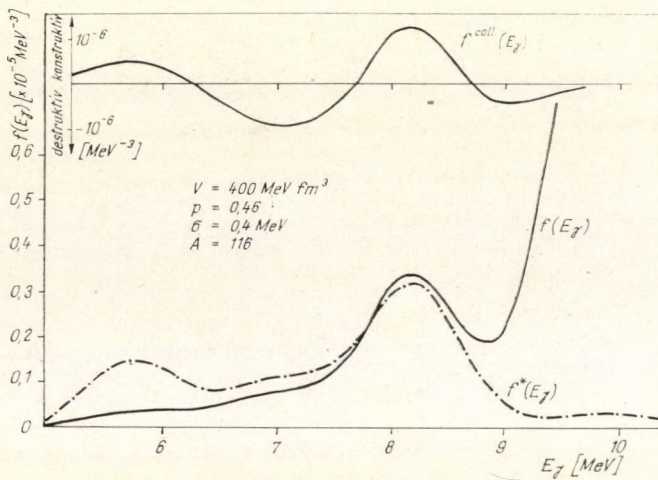


10. ábra. Az  $f_{E1}(E_\gamma)$  erősségfüggvény egy részlete az  $f^*(E_\gamma)$  parciális erősségfüggvényekkel ( $V_0 = 400 \text{ MeV fm}^3$ ,  $p = 0.46$ )

( $\sim 7 \text{ MeV}$ ) destruktivitás erőssége ( $|\text{Min } f^{\text{coll}}(E_\gamma)|$ ) majdnem egyenlő ( $\sim 75\%$ ) a  $8.2 \text{ MeV}$ -nél fellépő ( $|\text{Max } f^{\text{coll}}(E_\gamma)|$ ) konstruktív erősséggel (11. ábra).

Összefoglalva számításaink a zérus távolságú maradékkölcsönhatások paramétereitől függetlenül azt eredményezték, hogy küszöbállapotok jelenlétében az erősség nagy része lecsatolódhat az óriászrezonanciáról és a kísérletekben megfigyelt anomális viselkedésű erősségfüggvény kialakulását okozhatja. A számításokban az anomália karakterisztikus tulajdonságait a küszöbállapotok kollektív viselkedése okozza, az anomális csúcs a küszöbállapotok konstruktív interferenciájának eredménye, míg az alacsonyabb energián fellépő csökkenést a küszöbállapotok destruktív inter-





11. ábra. Az  $f_{E1}(E_\gamma)$  erősségfüggvény részlete az  $f^*(E_\gamma)$  parciális erősségfüggvénnyel és az  $f^{\text{coll}}(E_\gamma)$  erősségfüggvénnyel együtt. ( $V_0 = 400 \text{ MeV fm}^3$ ,  $p = 0.46$ ,  $A = 116$ .)

ferenciája okozza. Meg kell jegyezni, hogy az eddigi elméleti magyarázatok vagy csak az anomális csúcs fellépését vagy csak az erősséghiányt indokolták meg, és a kollektivitás kérdését egyáltalán nem vizsgálták. Egyes elméleti számítások [27, 28] más hatásokat vesznek figyelembe, mint például a küszöb közelében a határfeltételek változásának a háttérállapotokra való szétterülésre gyakorolt hatását. Ezen hatásokat additívan kell figyelembe venni és a kísérletekben észlelt erősségfüggvényt ezen hatások együttesen alakítják ki.

Az a kérdés, hogy az itt nem vizsgált tényezők, a véges hatótávolságú maradékkölcsönhatás, más báziskonfigurációk, háttérállapotokra való szétterülés realizti-kusabb figyelembevétele, mennyire befolyásolják a kapott eredményeket, további vizsgálatok feladata lesz.

## 7. KÖSZÖNETNYILVÁNÍTÁS

Elsősorban Dr. Zimányi Józsefnek szeretnék köszönetet mondani, Ő hívta fel figyelmemet a dolgozat témájára. Munkámat mindvégig figyelemmel kísérte és sok hasznos tanáccsal és ötlettel segítette elő.

Köszönet illeti Dr. Gyarmati Borbálát és Dr. Lovas Rezsőt, akik igen nagy segítséget nyújtottak a gépi számítások megkönnyítése terén, és figyelemmel kísérték a munka részeredményeit. Lovas Rezsőnek külön köszönöm azt a fáradságos munkát, amit a maradékkölcsönhatás lyukrézecske mátrixelemei kiszámításának ellenőrzésébe fektetett.

Végül köszönettel tartozom Dr. Lovas Istvánnak, aki hasznos tanácsokat adott a dolgozat és a vele kapcsolatos munkák elkészítése során.



## I. FÜGGELÉK

## A dipól átmeneti valószínűség meghatározása

Jellemezze a mag gerjesztett állapotát a

$$|\psi(JM)\rangle = \sum_c A_c \sum_{m_p m_h} (j_h m_h j_p m_p | JM) (-1)^{j_h - m_h} a_p^+ a_h | g \rangle \quad (I.1)$$

állapotvektor. A gerjesztett állapotból egy  $E1$  foton kibocsátásával járó átmenet vezet az állapotra. Az  $E1$  foton emisszióját leíró operátor a következő:

$$D(1, \nu) = \sum_{ij} e \langle i | D | j \rangle a_i^+ a_j, \quad (I.2)$$

ahol

$$\langle i | D | j \rangle = \int d^3 r \Phi_i^*(r) \tau_3 r Y_{1\nu}^*(\hat{r}) \Phi_j(r).$$

$\tau_3$  az izospin  $Z$ -komponensének operátora azaz  $\tau_3 \chi_{tt} = \tau \chi_{tt}$  és  $\nu$  pedig a foton impulzus momentumának  $Z$ -komponense. A keresett átmeneti amplitúdót az alapállapot és a  $|\Phi_c(JM)\rangle$  bázisvektorok között elegendő meghatároznunk és ezek segítségével megkaphatjuk azután az átmeneti amplitúdót a  $|\psi(JM)\rangle$  gerjesztett állapot és a  $|g\rangle$  alapállapot közt ( $J_g = 0^+$  esetre korlátozódva).

$$E_{1\nu}^{(c)} \equiv \langle g | D(1, \nu) | \Phi_c(JM) \rangle; \quad (I.3)$$

$$\langle g | D(1, \nu) | \psi(JM) \rangle = \sum_c A_c \langle g | D(1, \nu) | \Phi_c(JM) \rangle = \sum_c A_c E_{1\nu}^{(c)}. \quad (I.4)$$

Fejezzük ki  $E_{1\nu}^{(c)}$ -t (I. 2) segítségével:

$$E_{1\nu}^{(c)} = \sum_{ij} e \langle i | D | j \rangle \langle g | a_i^+ a_j a_p^+ a_h | g \rangle. \quad (I.5)$$

Mivel:

$$\langle g | a_i^+ a_j a_p^+ a_h | g \rangle = \delta_{ih} \delta_{jp}, \quad (I.6)$$

$E_{1\nu}^{(c)}$  a következő egyszerűbb alakot veszi fel:

$$\begin{aligned} E_{1\nu}^{(c)} &= e \int d^3 r \Phi_h^*(r) \tau_3 r Y_{1\nu}^*(\hat{r}) \Phi_p(r) = \\ &= e \sum (-1)^{j_h - m_h} (j_h m_h j_p m_p | JM) \left( l_h \lambda_h \frac{1}{2} \mu_h | j_h - m_h \right) \times \\ &\times \left( l_p \lambda_p \frac{1}{2} \mu_p | j_p m_p \right) i^{l_p - l_h} \langle \chi_{tt} | \tau_3 | \chi_{tt} \rangle \langle \chi_{\frac{1}{2} \mu_p} | \chi_{\frac{1}{2} \mu_h} \rangle \int dr v_h(r) v_p(r) \int d\hat{r} Y_{l_h \lambda_h}^* Y_{1\nu}^* Y_{l_p \lambda_p}. \end{aligned} \quad (I.7)$$

Alakítsuk át a fenti kifejezést a következő összefüggések felhasználásával:

$$\int d\hat{r} Y_{l_h \lambda_h}^* Y_{1\nu}^* Y_{l_p \lambda_p} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \frac{\hat{l}_h}{\hat{l}_p} (l_h 0 1 0 | l_p 0) (l_h \lambda_h 1 \nu | l_p \lambda_p) =$$

$$= \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \frac{\hat{l}_p \hat{l}_h}{\hat{1}} (-1)^{l_h} (l_p 0 l_h 0 | 1 0) (-1)^{l_h - \lambda_h} (l_p \lambda_p l_h - \lambda_h | 1 \nu),$$

$$\langle \chi_{tt} | \tau_3 | \chi_{tt} \rangle = \tau,$$

$$\langle \chi_{\frac{1}{2} \mu_h} | \chi_{\frac{1}{2} \mu_p} \rangle = \delta_{\mu_p \mu_h} = \frac{\hat{1}}{2} (-1)^{\frac{1}{2} - \mu_h} \left( \frac{1}{2} \mu_p \frac{1}{2} - \mu_h | 0 0 \right),$$

$$(-1)^{j_h - m_h} (j_h m_h j_p m_p | JM) = (-1)^{j_h + m_h} (-1)^{-2m_h} (-1)^{j_h + j_p - J} (j_p m_p j_h m_h | JM) \quad (I.8)$$



és az összegzésnél az  $(m_h \rightarrow -m_h)$  összegzési sorrendfelcserélést hajtsuk végre. Ekkor a következő alakot nyerjük:

$$E_{1v}^{(c)} = e\tau \frac{1}{\sqrt{4\pi}} (-1)^{2m_h} (-1)^{l_h} (-1)^{j_h+j_p-J} \frac{\hat{1}\hat{l}_p\hat{l}_h}{\hat{1}} (l_p 0 l_h 0 | 10) \times \\ \times i^{l_p-l_h} \sum \left( l_p \lambda_p \frac{1}{2} \mu_p | j_p m_p \right) \left( l_h \lambda_h \frac{1}{2} \mu_h | j_h m_h \right) (-1)^{l_h-\lambda_h} \times \\ \times (l_p \lambda_p l_h -\lambda_h | 1v) (-1)^{\frac{1}{2}-\mu_h} \left( \frac{1}{2} \mu_p \frac{1}{2} -\mu_p | 00 \right) (-1)^{j_h-m_h} \times \\ \times (j_p m_p j_h -m_h | JM) \langle v_h | r | v_p \rangle. \quad (I.9)$$

Az összegzést elvégezve a következőt nyerjük:

$$E_{1v}^{(c)} = e\tau \langle v_h | r | v_p \rangle \frac{1}{\sqrt{4\pi}} (-1)^{j_p+j_h+l_h-J+1} i^{l_p-l_h} \frac{\hat{1}\hat{l}_p\hat{l}_h}{\hat{1}} \times \\ \times (l_p 0 l_h 0 | 10) \hat{1}\hat{j}_p\hat{j}_h (1v 00 | JM) \begin{Bmatrix} j_p & j_h & J \\ l_p & l_h & 1 \\ 1/2 & 1/2 & 0 \end{Bmatrix}. \quad (I.10)$$

A 9—j szimbólum Racah-együtthatóvá redukálódik, mivel 0-t tartalmaz, az öt megelőző Clebsch—Gordan együttható pedig a gerjesztés kiválasztási szabályát biztosítja:

$$(1v 00 | JM) = \delta_{1J} \delta_{vM}. \quad (I.11)$$

$$E_{1v}^{(c)} = e\tau \langle v_h | r | v_p \rangle \frac{1}{\sqrt{4\pi}} (-1)^{j_p+j_h+l_h-J+1} \delta_{1J} \delta_{vM} i^{l_p-l_h} \frac{\hat{1}\hat{l}_p\hat{l}_h}{\hat{1}} \hat{j}_p\hat{j}_h \times \\ \times (l_p 0 l_h 0 | 10) \frac{(-1)^{1+\frac{1}{2}-j_p-l_h}}{\hat{\frac{1}{2}}\hat{1}} W \left( l_p l_h j_p j_h : 1 \frac{1}{2} \right). \quad (I.12)$$

A Clebsch—Gordan együttható és a Racah-együttható szorzata nagymértékben egyszerűsödik ui.:

$$W \left( l_p l_h j_p j_h : 1 \frac{1}{2} \right) = W \left( j_p l_p j_h l_h : \frac{1}{2} 1 \right)$$

felhasználásával az

$$(l_p 0 l_h 0 | 10) \hat{l}_p \hat{l}_h W \left( j_p l_p j_h j_h : \frac{1}{2} 1 \right) = \left( j_p \frac{1}{2} j_h - \frac{1}{2} | 10 \right) S(l_p, l_h, 1)$$

összefüggés alkalmazható, és így  $E_{1v}^{(c)}$  a következő egyszerű alakot ölti:

$$E_{1v}^{(c)} = e\tau \frac{1}{\sqrt{4\pi}} (-1)^{j_p+j_h+l_h+1+\frac{1}{2}-j_p-l_h} i^{l_p-l_h} \delta_{J1} \delta_{Mv} \times \\ \times \langle v_h | r | v_p \rangle \frac{\hat{j}_p\hat{j}_h}{\hat{1}} \left( j_p \frac{1}{2} j_h - \frac{1}{2} | 10 \right) S(l_p, l_h, 1). \quad (I.13)$$



A Clebsch—Gordan együtthatót átalakítva a következő összefüggést nyerhetjük:

$$E_{1\nu}^{(c)} = -\frac{e\tau}{\sqrt{4\pi}} (-1)^{j_p+\frac{1}{2}} \delta_{j_1} \delta_{m_\nu} \frac{j_p j_h}{1} i^{l_p-l_h} \langle v_h | r | v_p \rangle \left( j_h - \frac{1}{2} j_p \frac{1}{2} | 10 \right) S(l_p, l_h, 1), \quad (\text{I.14})$$

ahol  $S$  a számolás során előfordult  $(l_p 0 l_h 0 | 10)$  Clebsch—Gordan együtthatónak megfelelően, az állapot paritását őrző tényező:

$$S(l_p, l_h, 1) = \frac{1}{2} (1 + (-1)^{l_p+l_h+1}). \quad (\text{I.15})$$

Az  $e\tau$  szorzat helyett effektív értéket alkalmazunk [12]:

$$(e\tau)_{\text{eff.}} = \begin{cases} e \left( 1 - \frac{Z}{A} \right); & \tau = \frac{1}{2} \quad (\text{protonokra}) \\ -e \frac{Z}{A}; & \tau = -\frac{1}{2} \quad (\text{neutronokra}) \end{cases}, \quad (\text{I.16})$$

ahol  $e$  a proton töltése.

Jelöljük az elektromos dipól mátrixelemet a következőképp:

$$Q_{1\nu}^E(JM, g) = \langle g | D(1, \nu) | \psi(JM) \rangle = \sum_c A_c \langle g | D(1, \nu) | \Phi_c(JM) \rangle = \sum_c A_c E_{1\nu}^{(c)}. \quad (\text{I.17})$$

Az elektromos vagy mágneses multipól sugárzás átmeneti valószínűsége általános esetben az  $i$  kezdeti állapotból az  $f$  végállapotba:

$$T_{i \rightarrow f}^{(XLM)} = \frac{1}{\hbar} \frac{8\pi(L+1)}{L[(2L+1)!!]^2} \left( \frac{\omega}{c} \right)^{2L+1} |\langle f | Q_{LM}^X | i \rangle|^2, \quad (\text{I.18})$$

ahol  $E_\gamma = \hbar\omega$ ,  $c$  a fénysebesség és  $Q_{LM}^X$  az elektromos vagy mágneses ( $X=E, M$ ) multipól operátor ([32] (51)).

Esetünkben elektromos dipól sugárzás esetén:

$$T_{\psi(JM) \rightarrow g}^{(E1\nu)} = \frac{1}{\hbar} \frac{8\pi \cdot 2}{1[3!!]^2} \left( \frac{\omega}{c} \right)^3 |Q_{1\nu}^E(JM, g)|^2 = \frac{16\pi}{9\hbar} \left( \frac{\omega}{c} \right)^3 |Q_{1\nu}^E(JM, g)|^2. \quad (\text{I.19})$$

Az átmeneti valószínűség a végállapot  $m_f$  mágneses kvantumszámaira összegezve és a kezdeti állapot  $m_i$  mágneses kvantumszámaira átlagolva a következő alakban írható:

$$T_{i \rightarrow f}^{(XL)} = \frac{1}{(2j_i+1)} \sum_{m_i} \sum_{m_f} \sum_M T_{i \rightarrow f}^{(XLM)}, \quad (\text{I.20})$$

amely a  $J_g^\pi=0^+$ -os végállapotra vezető elektromos dipól sugárzás esetén a következő alakot veszi fel:

$$T_{\psi(J) \rightarrow g}^{(E1)} = \frac{1}{2J+1} \sum_M \sum_\nu \frac{1}{\hbar} \frac{16\pi}{9} |Q_{1\nu}^E(JM, g)|^2. \quad (\text{I.21})$$



Az összegezéshez alakítsuk át a mátrixelemet a Wigner—Eckart tétel segítségével [26]:

$$\begin{aligned} Q_{1\nu}^E(JM, g) &= \langle J_g = 0, M_g = 0 | D(1, \nu) | \psi(J, M) \rangle = \\ &= (JM | 1\nu | 00) \langle g | D(1) | \psi(J) \rangle = \frac{(-1)^{J-M}}{f} \langle g | D(1) | \psi(J) \rangle \delta_{J1} \delta_{M, -\nu}. \end{aligned} \quad (I.22)$$

Ennek segítségével az összeg:

$$\begin{aligned} \sum_{M\nu} |Q_{1\nu}^E(JM, g)|^2 &= \frac{1}{2J+1} \delta_{J1} |\langle g | D(1) | \psi(J) \rangle|^2 \sum_{M=-J}^J \sum_{\nu=-1}^1 \delta_{M, -\nu} = \\ &= \delta_{J1} |\langle g | D(1) | \psi(J) \rangle|^2. \end{aligned} \quad (I.23)$$

Felhasználva (I.22)-t a redukált mátrixelemet kifejezhetjük egy nem redukált mátrixelem segítségével:

$$Q_{10}^E(10, g) = (1010 | 00) \langle g | D(1) | \psi(J) \rangle = \frac{-1}{\sqrt{3}} \langle g | D(1) | \psi(1) \rangle,$$

ahonnan

$$\langle g | D(1) | \psi(1) \rangle = -\sqrt{3} Q_{10}^E(10, g). \quad (I.24)$$

(I. 21, 23. 24) felhasználásával az átmeneti valószínűség esetünkben:

$$\begin{aligned} T_{\psi(J) \rightarrow g}^{(E1)} &= \frac{1}{2J+1} \frac{1}{\hbar} \frac{16\pi}{9} \left( \frac{\omega}{c} \right)^3 \delta_{J1} (2J+1) |Q_{10}^E(10, g)|^2 = \\ &= \frac{16\pi}{9\hbar} \left( \frac{\omega}{c} \right)^3 \delta_{J1} |Q_{10}^E(10, g)|^2. \end{aligned} \quad (I.25)$$

Az inverz reakció átmeneti valószínűsége szerint általánosan, majd a számunkra érdekes esetre specializálva [32]:

$$T_{g \rightarrow \psi(J)}^{(E1)} = \frac{2J+1}{2J_g+1} T_{\psi(J) \rightarrow g}^{(E1)} = 3 \frac{16\pi}{9\hbar} \left( \frac{\omega}{c} \right)^3 \delta_{J1} |Q_{10}^E(10, g)|^2. \quad (I.26)$$

Az ezen átmenethez tartozó szélesség tehát felhasználva (I.4)-et:

$$\Gamma_{g \rightarrow \psi(J)}^{(E1)} = \frac{16\pi}{3} \left( \frac{\omega}{c} \right)^3 \delta_{J1} \left| \sum_c A_c E_{10}^{(c)} \right|^2. \quad (I.27)$$

Ugyanis:

$$\Gamma_{i \rightarrow f}^{(XL)} = \hbar T_{i \rightarrow f}^{(XL)}.$$

Gyakran használatos az úgynevezett [26] redukált átmeneti valószínűség:

$$\begin{aligned} B(XL, J_i \rightarrow J_f) &= \sum_{MM_f} |\langle J_f M_f | Q_{LM}^X | J_i M_i \rangle|^2 = \frac{1}{2J_i+1} \sum_{MM_i M_f} |\langle J_f M_f | Q_{LM}^X | J_i M_i \rangle|^2 = \\ &= \frac{1}{2J_i+1} |\langle J_f || Q_L^X || J_i \rangle|^2. \end{aligned} \quad (I.28)$$



(I. 20)-szal összehasonlítva látható, hogy a  $T_{i \rightarrow f}^{(XL)}$  átmeneti valószínűségre a következő egyszerűbb kifejezés írható fel:

$$T_{i \rightarrow f}^{(XL)} = \frac{1}{\hbar} \frac{8\pi(L+1)}{L[(2L+1)!!]^2} \left(\frac{\omega}{c}\right)^{2L+1} B(XL, J_i \rightarrow J_f). \quad (\text{I.29})$$

A kísérletek szempontjából vizsgálva alapvető fontosságú a fotoabszorpciós hatáskeresztmetszet meghatározása. A foton abszorpcióját követően a közbenső állapot elbomolhat különféle módokon. Egy  $(\gamma, p)$  reakció hatáskeresztmetszete például kifejezhető:

$$\sigma_{(\gamma p)} = \sigma_{\gamma a} \cdot W_p \quad (\text{I.30})$$

alakban, ahol  $\sigma_{\gamma a}$  a  $\gamma$ -abszorpciós hatáskeresztmetszet,  $W_p$  pedig a protonemisszió valószínűségének aránya a teljes bomlási valószínűséghez képest.

A fotoabszorpciós hatáskeresztmetszet [12] (XII. 7. 26) felhasználásával a következőképpen írható fel:

$$\begin{aligned} \sigma_{\gamma a XL}^{J_f} &= \frac{4\pi^3(L+1)(2L+1)}{L[(2L+1)!!]^2} \left(\frac{\omega}{c}\right)^{2L-1} \frac{1}{D_J(E_f)} \frac{1}{(2J_i+1)} \times \\ &\times \sum_{M_i M_f} \langle |\langle f | Q_{L1}^X | i \rangle|^2 + |\langle f | Q_{L-1}^X | i \rangle|^2 \rangle_{\text{av.}} \end{aligned} \quad (\text{I.31})$$

Alakítsuk át ezt a kifejezést, először az összegzést elvégezve a Wigner—Eckart tétel felhasználásával:

$$\begin{aligned} \sum_{M_i M_f} |\langle J_f M_f | Q_{L1}^X | J_i M_i \rangle|^2 &= \frac{1}{2J_f+1} |\langle J_f || Q_L^X || J_i \rangle|^2 \sum_{M_i M_f} (J_i M_i L 1 | J_f M_f)^2 = \\ &= \frac{1}{2J_f+1} |\langle J_f || Q_L^X || J_i \rangle|^2 \frac{2J_f+1}{2L+1} \sum_{M_i M_f} (J_i M_i J_f - M_f | L-1)^2 = \frac{|\langle J_f || Q_L^X || J_i \rangle|^2}{2L+1}. \end{aligned} \quad (\text{I.32})$$

Hasonlóképpen elvégezhető az összegzés a  $Q_{L-1}^X$  operátor mátrixelemeire is, és ugyan-  
ezt az eredményt kapjuk. Végül felírjuk az abszorpciós hatáskeresztmetszetet:

$$\bar{\sigma}_{\gamma a XL}^{J_f} = \frac{8\pi^3(L+1)}{L[(2L+1)!!]^2} \left(\frac{\omega}{c}\right)^{2L-1} \frac{1}{D_{J_f}(E_f)} \left\langle \frac{|\langle J_f || Q_L^X || J_i \rangle|^2}{2J_i+1} \right\rangle_{\text{av.}}. \quad (\text{I.33})$$

Itt az utolsó tényező a redukált átmeneti mátrixelem átlaga (az átlagolás a végállapot körüli egységnyi energiaintervallumra értendő 1.: [12]), következőképpen:

$$\bar{\sigma}_{\gamma a XL}^{J_f} = \frac{8\pi^3(L+1)}{L[(2L+1)!!]^2} \left(\frac{\omega}{c}\right)^{2L-1} \frac{\langle B(XL, J_i \rightarrow J_f) \rangle_{\text{av.}}}{D_{J_f}(E_f)}. \quad (\text{I.34})$$

Ezt a kifejezést érdemes összehasonlítani a fotobomlás átmeneti valószínűségének (I. 29) kifejezésével. Az inverz folyamatokra vonatkozó (I. 26) kifejezést felhasználva:

$$\bar{\sigma}_{\gamma a XL}^J = g(J) \frac{\langle \hbar T_{\psi(J) \rightarrow g}^{(XL)} \rangle_{\text{av.}}}{D_J(E_J) E_J^2} \pi^2 \hbar^2 c^2, \quad (\text{I.35})$$

ahol

$$g(J) = \frac{2J+1}{2J_g+1}.$$



Hasonlóan a gamma-abszorpciós hatáskeresztmetszetekhez a kísérletek kiértékelésében nagy jelentőséggel bír a befogás utáni (pl.:  $(n, \gamma)$  primer gamma-emisszió spektráloszlásának meghatározása.

Az átlagos spektráloszlás  $v_{XL}^J(E_\gamma)$  egységnyi gamma-energia intervallumra,  $E_J$  energiájú, egységnyi kezdeti populációjú  $J^\pi$  spinű és paritású kezdeti állapotból történő  $XL$  multipolaritású fotobomlás esetén (l.: [12]):

$$v_{XL}^J(E_\gamma) = \frac{\bar{\Gamma}_{\gamma\psi(J) \rightarrow f}^{(XL)}}{\bar{\Gamma}_{\psi(J)}^{(T)}} \sum_{I=J-L}^{J+L} \varrho_I(E_J - E_\gamma), \quad (I.36)$$

ahol  $E_J - E_\gamma = E_f$  és a

$$\bar{\Gamma}_{\gamma\psi(J)}^{(T)} = \sum_{XL} \int_0^{E_J} \bar{\Gamma}_{\gamma\psi(J) \rightarrow f}^{(XL)} \sum_{I=J-L}^{J+L} \varrho_I(E_f) dE_f$$

átlagos teljes  $\gamma$ -szélességen felül a  $\bar{\Gamma}_{\psi(J)}^{(T)}$  tartalmazza a részecske küszöb felett, a szélességeket az összes nyitott részecskecsatornára is.

Az összefüggések egyszerűsíthetők, ha figyelembe vesszük az állapot sűrűség

$$|\varrho_J(E) = \varrho_0(E)(2J+1) \exp \left[ -\frac{\left(J + \frac{1}{2}\right)^2}{2\sigma^2} \right]$$

szokásos feltételezett alakját [33]. Ebben  $\sigma$  egy úgynevezett spinlevágási faktor (értéke a tömegszámmal növekedő 3—5 közötti érték.)

Ezt figyelembe véve alacsony spinű magokra, közepes és nagyobb tömegszámok esetén,  $E1$  sugárzást tekintve az összeg jól közelíthető a következő módon [1]:

$$\sum_{I=J-1}^{J+1} \varrho_I(E) = 3\varrho_0(E)(2J+1) e^{-\frac{(J+1/2)^2}{2\sigma^2}}. \quad (I.37)$$

Ezt a közelítést az erősségfüggvénnyel való összevetésnél használhatjuk majd ki.

Legvégül, de nem utolsó sorban meg kell említeni az átmeneti valószínűség Weisskopf-egységét és felírhatjuk az átmeneti valószínűséget ilyen egységekben. Tekintsük egységnyinek a Blatt és Weisskopf [12] által bevezetett egyszerű modellben kapott átmeneti valószínűséget (XII. 6., 8.), amely elektromos multipól átmenet esetén:

$$T_{W.}^{(EL)} = \frac{1}{\hbar} \frac{2(L+1)}{L[(2L+1)!!]^2} \left( \frac{3}{L+3} \right)^2 e^2 R^{2L} (\hbar c)^{-(2L+1)} E_\gamma^{2L+1}. \quad (I.38)$$

Ez dipól sugárzás esetén a következő speciális alakot veszi fel:

$$T_{W.}^{(E1)} = \frac{1}{\hbar} \frac{e^2 R^2}{4(\hbar c)^3} E_\gamma^3. \quad (I.39)$$

Ha számításunk eredményét Weisskopf-egységben akarjuk megkapni a (I. 25)-ben megadott értéket ezzel az átmeneti valószínűséggel elosztjuk:

$$T_{\psi(J) \rightarrow g[W.U.]}^{(E1)} = \frac{T_{\psi(J) \rightarrow g}^{(E1)}}{T_{W.}^{(E1)}} = \frac{64\pi}{9R^2 e^2} \delta_{J1} |Q_{10}^E(10, g)|^2. \quad (I.40)$$

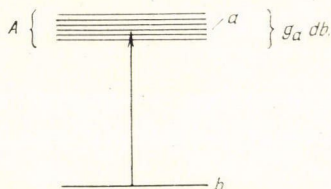


## II. FÜGGELÉK

### A gamma-erősségfüggvény

Az erősségfüggvény bevezetésének alapja a *Bohr* [34] által bevezetett közbenső magmodell alapgondolata: az egyszerű gerjesztések keveredése a hozzá közeli energiájú bonyolultabb struktúrájúakkal. Magát az erősségfüggvény elnevezést *Wigner* [35] használta először. Az erősségfüggvényre vonatkozó korai vizsgálatok igen erős csatolást tételeztek fel az egyszerű gerjesztések és a háttérállapotok között és ez az erősség egyenletes eloszlását eredményezte. Ilyen korai bevezetést láthatunk *Blatt* és *Weisskopf* [12] könyvében.

Tegyük fel, hogy egy alsó  $b$  szintről a felette levő  $A$  szintek



egyikére,  $a$ -ra történik átmenet. Ez a felső energiaszint (az  $A$  csoport)  $g_a$  szorosan elfajult, és ezt az elfajulást egy kis maradékkölcsönhatás húzza csak szét. Az ilyen átmeneteknél az egy átmenetre eső mátrixelem kisebb, mégpedig hozzávetőlegesen  $|Q(b, a)|^2 \approx Q_0^2/g_a$ . Közelítőleg azt mondhatjuk, hogy a magasabb energiájú átmeneteknél a felső energiaszinten levő állapotok elfajultsága az ottani állapotsűrűséggel jellemezhető. Így az egy átmenetre jutó átmeneti „erősség” csökken:

$$\langle |Q_{LM}^X(b, a)|^2 \rangle_{av.} = \frac{q_{LM}^X(b, a)}{Q_L(E_{felső})},$$

$$E_{felső} = \text{Max}(E_a, E_b). \quad (\text{II.1})$$

A feltételezés szerint az átlagos mátrixelem főleg az elfajulások számának növekedése miatt változik és így a  $q_{LM}^X(b, a)$  egy közelítően állandónak tekinthető mennyiség. Értékét az alacsonyan fekvő állapotok közti átmeneti valószínűség figyelembevételével megbecsülhetjük. Ha egy ilyen átmenetnél az átmeneti mátrixelem értéke  $Q_0$  és ezen állapotok átlagos energiaszinttávolsága  $D_0 = Q_0^{-1}$ , akkor  $q$  értékét a következőképp becsülhetjük:

$$q_{LM}^X(b, g) \cong \frac{|Q_0|^2}{D_0}. \quad (\text{II.2})$$

*Blatt* és *Weisskopf* az általuk bevezetett, és a későbbiekben Weisskopf-egységnek nevezett, értékkel becsülték az átmeneti mátrixelemet,  $Q_0$ -t, és így a  $q$  értékére a következőt kapták [12] (XII—7.17)

$$q_{LM}^X(b, g) \cong \left( \frac{3}{L+3} \right)^2 \frac{e^2 R^{2L}}{4\pi D_0}. \quad (\text{II.3})$$



Itt feltettük az egyszerűség kedvéért, hogy az átmenet az alapállapotra vezet, és  $E_g = 0$ .

Könnyen belátható azonban, hogy a  $q_{LM}^X(b, g)$  nem lehet az egész energia-tartományban állandóan a fenti érték. Az összegszabályt ugyanis felírhatjuk integrálként a  $q$  függvény segítségével:

$$\sum_b |Q_{LM}^X(b, g)|^2 \cong \int_0^\infty \langle |Q_{LM}^X(b, g)|^2 \rangle_{av.} \varrho_L(E_b) dE_b = \int_0^\infty q_{LM}^X(b, g) dE_b. \quad (\text{II.4})$$

Másrészt az összegszabály a következő értéket kell, hogy adja [12] (XII. 7. 11.):

$$\sum_b |Q_{LM}^E(b, g)|^2 \cong \frac{3}{2L+3} \frac{Ze^2}{4\pi} R^{2L}. \quad (\text{II.5})$$

Ennek alapján Blatt és Weisskopf [12] a  $q_{LM}^E(b, g)$  függvényt mint a felső energiaszint,  $E_b$ , függvényét a következőképp adták meg:

$$q_{LM}^E(E_b) = \begin{cases} \left( \frac{3}{L+3} \right)^2 \frac{e^2 R^{2L}}{4\pi D_0}; & 0 \leq E_b \leq E_{\max}, \\ 0 & ; E_b \geq E_{\max}. \end{cases} \quad (\text{II.6})$$

ahol  $E_{\max} \cong Z D$ . Blatt és Weisskopf [12] még nem használják az erősségfüggvény kifejezést, azonban a  $q_{LM}^E$  függvény csak konstans szorzóban különbözik ettől.

A gamma-erősség függvény ma használatos definíciója a következő:

$$S_{\mu\lambda XL}^J(E_\gamma) = \langle \Gamma_{\gamma\lambda \rightarrow \mu}^{(XL)} \rangle_{av.} \varrho_J(E_\lambda) = \bar{\Gamma}_{\gamma\lambda \rightarrow \mu}^{(XL)} \varrho_J(E_\lambda), \quad (\text{II.7})$$

ahol  $\mu$  és  $\lambda$  a két állapotot jelöli, amelyek között az átmenet megtörtént. Ezek közül a magasabb energiájú állapot  $J^\pi$  (röviden jelölve  $J$ ) spinű és paritású. Az átmenet egy  $XL$  multipolaritású gamma-átmenet.  $\bar{\Gamma}_{\gamma\lambda \rightarrow \mu}^{(XL)}$  az átmenethez tartozó szélesség (I. 20, I. 27) átlagolva a  $\lambda$  felső állapot körüli azonos spinű és paritású állapotokra.  $\varrho_J(E_\lambda)$  ezen állapotok szintsűrűsége.

Gyakrabban használatos a redukált erősség függvény:

$$f_{\mu\lambda XL}^J(E_\gamma) = E_\gamma^{-(2L+1)} S_{\mu\lambda XL}^J(E_\gamma). \quad (\text{II.8})$$

Eddig nem tárgyaltuk, hogy a  $\mu$  és  $\lambda$  állapotok közül melyik az  $i$ -vel jelölt kezdeti és melyik az  $f$ -fel jelölt végállapot.

A 12. ábrán látható két folyamat megkülönböztetését az erősség függvény definíciójában is megtehetjük [1]. A  $|g\rangle$  alapállapotból való fotogerjesztés esetén az erősségfüggvényt jelöljük  $\tilde{f}_{g\lambda XL}^J(E_\gamma)$ -val, míg a fotobomlás esetében  $\tilde{f}_{\mu\lambda XL}^J(E_\gamma)$  legyen a jelölés, az első esetben  $E_\gamma = E_\lambda$ , míg a második esetben  $E_\gamma = E_\lambda - E_\mu$ . Az előbbi elméleti becslés Blatt és Weisskopf [12] könyvében nem tesz különbséget az  $\tilde{f}$  és  $\tilde{f}$  között. Ezért és az erősség egyenletes elosztása miatt mint extrém statisztikus modellt is szokták emlegetni.

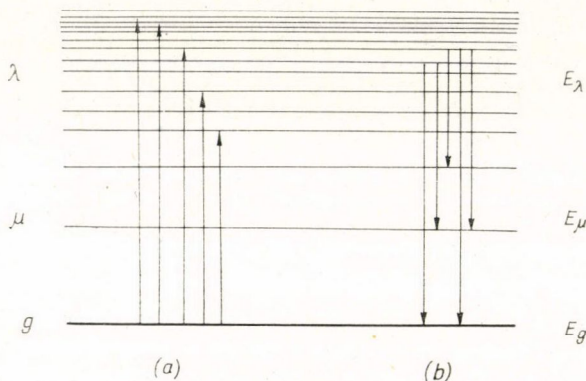
Az  $\tilde{f}$ -re egy finomabb, és a kísérletek kiértékelésére is alkalmasabb becslést adott meg Axel [14]. Az erősségfüggvényt a fotoabszorpciós hatáskeresztmetszet segítségével határozta meg; összehasonlítva az erősségfüggvény definícióját (II. 7—8) és a



fotoabszorpciók hatáskeresztmetszetre kapott (I. 35) kifejezést, az összefüggést mi is felírhatjuk:

$$\bar{f}_{g\lambda XL}^J(E_\gamma) = \frac{\bar{\sigma}_{\gamma a XL}^J(E_\gamma)}{g(J)\pi^2\hbar^2 c^2 E_\gamma^{2L-1}}. \quad (\text{II.9})$$

A kísérleti irodalommal való összehasonlítás végett érdemes megjegyezni, hogy a  $(\pi \hbar c)^{-2}$  konstans értéke  $26,021 \cdot 10^{-8} \text{ MeV}^{-2} \text{ mb}^{-1}$ , ugyanis ilyen alakban használatos majdnem minden forrásműben.



12. ábra. A  $\lambda$  index a felső szintet, illetve szintek egy csoportját jelzi, ezek ugyanolyan  $J_\lambda^\pi$  spinűek és paritásúak, míg  $\mu$  az alsó szintet vagy szintek egy csoportját jelzi. Két féle folyamatban lehet a sugárzási átmeneti szélességeket vizsgálni: a) fotóabszorpció a szintek egy tartományára, b) gamma-bomlás egy szűkebb  $\Delta E_\lambda$  intervallumból az alsó állapotokra

Brink megmutatta [13] egy egyszerű modellben, hogy ha az átlagolt abszorpciós hatáskeresztmetszetet a megengedett  $J$ -kre összegezzük, Lorentz-függvény alakot kapunk:

$$\bar{\sigma}_{\gamma a XL}(E_\gamma) = \sum \bar{\sigma}_{\gamma a XL}^J(E_\gamma) = C_{XL} \frac{\Gamma_G E_\gamma^2}{(E_\gamma^2 - E_G^2)^2 + \Gamma_G^2 E_\gamma^2}, \quad (\text{II.10})$$

ahol a  $C_{XL}$  együttható a multipolaritástól függ és az összszabályból meghatározható. Ezenkívül speciálisan  $EL$  átmenetekre egy további összefüggést is kimutatott:

$$\bar{\sigma}_{\gamma a E1}^J = \frac{g_J}{3} \bar{\sigma}_{\gamma a E1}. \quad (\text{II.11})$$

Az erősségfüggvény vizsgálatakor az elméleti modellekre támaszkodva két fontos további feltevést kell tenni. Mind a Blatt—Wiesskopf, mind Brink—Axel féle erősségfüggvények függetlenek a  $J$ -től és ezt további eredmények is alátámasztották. Ezért a továbbiakban az erősségfüggvényt  $J$ -től függetlennek tekintjük.

A második feltevés az ún. Brink hipotézis [13] nem ilyen egyszerű és nyilvánvaló (kivéve a Blatt, Weisskopf féle extrém statisztikus modellt, ahol nyilvánvaló). A hi-



potézis szerint  $\tilde{f}$ -nek egyenlőnek kell lennie  $\tilde{f}$ -fel. Elektromos dipól sugárzás esetére az  $\tilde{f}_{g\lambda E_1}(E_\gamma) = \tilde{f}_{i\lambda' E_1}(E_\gamma) = \tilde{f}_{i\lambda' E_1}(E_\gamma)$  azzal egyenértékű, hogy a fotoeffektus a kiinduló állapot szerkezetére nem érzékeny és energiafüggése ettől független. Azaz ha lehetséges lenne gerjesztett állapotban levő mag fotoeffektusát vizsgálni a kapott fotoabszorpciók hatáskeresztmetszet energiafüggésének meg kellene egyeznie az alapállapotéval. A hipotézist eddig elméleti számításokkal még nem vizsgálták meg kellően, de a kísérleti eredmények azt mutatták, hogy a vizsgált tartományokba a feltevés megállja helyét.

Az (II. 8—11) egyenletek adják az erősségfüggvény Brink—Axel féle alakját, amelyet az irodalomban gyakran használnak és a kísérleti eredmények kiértékelésénél a legfontosabb elméleti alap. Gyakran hivatkoznak erre az erősségfüggvényre mint Lorentz-függvényre, illetve az ettől való eltéréseket vizsgálják.

Az erősségfüggvény elméleti meghatározására módot adna a Bohr és Mottelson által bemutatott módszer [26]. Így ugyanis meghatározható egy állapotnak a háttérállapotokra történő szétterülése többféle közelítésben. Ez a módszer azonban több bizonytalan becslést tartalmazna és mindemellett igen bonyolult. Ezért egy lényegesen egyszerűbb utat választottunk.

Az általunk nyert héjmodell sajátállapotok és a hozzájuk tartozó  $T_{\psi(J) \rightarrow g}^{(E_1)}(E_i)$  átmeneti valószínűségek valódi magokról viszonylag kevés információt adnak a bázis korlátozottsága miatt. A valódi magban az  $E_i$  energiához közel eső tartományban nagyszámú bonyolultabb felépítésű gerjesztett állapot is van, legyen egy ilyen állapot energiája  $E_a$ . Ezek az állapotok a lyukrészcseke állapotokkal keverednek és lyukrészcseke komponensükön keresztül szintén  $E_1$  átmenettel bomolhatnak az alapállapotra. Így a lyukrészcseke állapotok átmeneti valószínűsége is szétoszlik a háttérállapotokra. Legegyszerűbb, ha a héjmodell sajátállapotokat, mint lyukrészcseke gerjesztéseket tekintve feltesszük, hogy minden ilyen gerjesztés az  $E_i$  sajátenergiához közeli állapotokra terül szét és a szétterülést egy normált Gauss-eloszlás írja le. Az egyszerűség kedvéért a Gauss-eloszlás szórását,  $\sigma$ -t, minden  $E_i$  sajátértékhez válasszuk ugyanannak és legyen ez az érték az  $E_i$  szintek átlagos távolságával egyenlő. Így Blatt és Weisskopf-hoz hasonlóan egy viszonylag síma erősségfüggvényt kapunk:

$$f_{E_1}(E_\gamma) = \hbar E_\gamma^{-3} \sum_{i=1}^N T_{\psi(J) \rightarrow g}^{(E_1)}(E_i) \frac{1}{\sqrt{2\pi} \sigma} \exp \left[ -\frac{(E_a - E_i)^2}{2\sigma^2} \right], \quad (\text{II.12})$$

ahol  $E_a = E_g + E_\gamma$ .

A képzésből következik, hogy az így nyert erősségfüggvény kielégíti az összegszabályt, feltéve, hogy a héjmodell számítás eredményei is kielégítik. Az így nyert erősségfüggvényben nem sikkadnak el a héjmodell számítás eredményei, így például az erősségfüggvényben jól látható az óriásrezonancia fellépése.

A (II.12) kifejezés értelmezésénél problémát szokott okozni az, hogy a szinttávolsággal való osztás hiányzik, az  $f_{E_1}(E_\gamma)$  definíciójából.

Első közelítésként azt mondhatjuk, hogy ezt a  $\sigma$  szórási paraméter helyettesíti, ennek értéke az előzőek szerint  $\sigma = 0,4 - 0,5$  MeV volt a konkrét számolásokban. Ez független az energiától és egyáltalán nem olyan tulajdonságú, mint a  $D_J(E_a)$  szinttávolság. Az erősségfüggvény (II. 7—8) definíciós képletében az egy átmenetekre eső átlagos valószínűség és a  $D_J(E_a)$  szinttávolság hányadosa szerepel. Pontosabban úgy értelmezhetjük a fenti közelítést, hogy mivel a héjmodell sajátállapotok nem sűrűsödnek a növekvő energiával, a háttérállapotok viszont igen, a magasabb energiájú



héjmodell saját állapot átmeneti erőssége több nívóra oszlana el, és ennek megfelelően ez a kisebb érték kisebb  $D_J(E_a)$  szinttávolsággal lenne osztva az erősségfüggvény képzésekor. Azonban, egységni energia intervallumban a háttérállapotok sűrűségétől függetlenül csak a (II.12)-ben meghatározott erősség oszlik szét. A továbbiakban a Brink hipotézist elfogadva az erősségfüggvényt csak  $f_{XL}(E_\gamma)$ -ként jelöljük, mint ahogy ezt az általunk bevezetett erősségfüggvénynél is tettük.

A számolás szempontjából érdemes megadni az erősségfüggvény kifejezését az átmeneti valószínűségek Weisskopf egységben kifejezett értékével, (II.12) és (I.40) alapján:

$$f_{E1}(E_\gamma) = \frac{e^2 R^2}{4(\hbar c)^3 \sqrt{2\pi} \sigma} \sum_i T_{\psi(J) \rightarrow g[\text{w. u.}]}^{(E1)}(E_i) \exp \left[ -\frac{(E_a - E_i)^2}{2\sigma^2} \right]. \quad (\text{II.13})$$

Az eddigiekben áttekintettük az erősségfüggvény bevezetésének módjait, a továbbiakban a kísérleti eredmények kiértékelése szempontjából fontosabb összefüggéseket már tárgyaljuk meg.

Az erősségfüggvény és a fotoabszorpciós hatáskeresztmetszet közti összefüggéseket már tárgyaltuk. Hasonlóan fontos a spektráeloszlás és az erősségfüggvény kapcsolata [1].

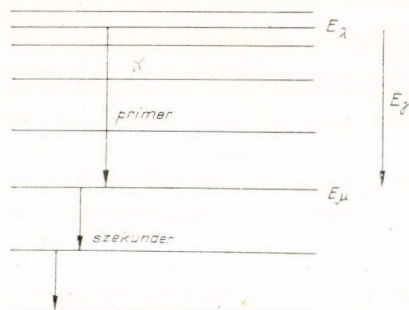
A spektráeloszlás (I.36) definícióját és az erősségfüggvény (II. 7—8) definícióját összevetve a spektráeloszlásra a következő kifejezést nyerjük:

$$v_{XL}^J = E_\gamma^{2L+1} \frac{f_{XL}(E_\gamma)}{\bar{\Gamma}_{\psi(J)}^{(T)}} \sum_{I=J-L}^{J+L} \varrho_I(E_\lambda - E_\gamma) [\varrho_J(E_\lambda)]^{-1}, \quad (\text{II.14})$$

amely felhasználva az (I.37) közelítést, a következő alakra egyszerűsödik:

$$v_{E1} = \frac{3E_\gamma^3 f_{E1}(E_\gamma) \varrho_0(E_\lambda - E_\gamma)}{\bar{\Gamma}_{\psi(J)}^{(T)} \varrho_0(E_\lambda)}. \quad (\text{II.15})$$

Ez azonban a  $\lambda$ -val jelzett felső szintről a  $\mu$ -vel jelzett alsó szintre történő primer sugárzás spektráeloszlását adja meg. A kísérletekben az első átmenetekhez tartozó és egy második vagy további átmenethez tartozó sugárzás nem választható külön, ezért a kísérletileg észlelhető spektráeloszlást még meg kell határoznunk:



Jelöljük meg a primer spektráeloszlás kifejezésében, hogy mely két szint közötti primer sugárzásra vonatkozik. Így pl. a szokásos  $\lambda \rightarrow \mu$  átmenetre legyen:

$$v_{\lambda\mu}(E_\gamma) = v_{\lambda\mu E1}(E_\gamma).$$



Tegyük fel, hogy a  $\lambda$  szintet gerjesztetjük, akkor egy lejjebb fekvő  $E_\eta$ -nál levő  $dE_\eta$  intervallumbeli szintek populációja,  $P_\eta$ , felírható a következőképpen:

$$P_\eta = \int_{E_\eta}^{E_\lambda} v_{\lambda\eta}(E_\lambda - E_\eta) P_\lambda dE_\lambda. \quad (\text{II.16})$$

Ezzel ha a legfelső  $\lambda$  szint populációja egységnyi ( $P_\lambda = 1$ ) meghatározható az alsóbb szintek populációja, és ennek segítségével pedig a totális spektráeloszlás,  $v_{\lambda\lambda}(E_\gamma)$ , a primer szekunder és további  $\gamma$ -sugárzásokra együttesen:

$$v_{\lambda\lambda}(E_\gamma) = \int_0^{E_\lambda - E_\gamma} v_{\eta\omega}(E_\eta - E_\omega) P_\eta dE_\omega, \quad (\text{II.17})$$

ahol  $\eta = \eta(\omega) - t$  az  $E_\eta = E_\omega + E_\gamma$  határozza meg.

A kísérleti eredmények kiértékelése ebben az esetben próbálkozással történik. Egy feltételezett próba erősségfüggvénnyel el kell végezni a vázolt eljárást, melynek végén egy totális spektráeloszlást nyerünk, ezt a spektráeloszlást összehasonlítva a kísérletből nyert spektráeloszlással meggyőződhetünk az erősségfüggvény helyességéről. Egy ilyen módszerrel nyert spektrumot mutat a 2. ábra.

Az ilyen módon történő kiértékelésnek van bizonyos bizonytalansága, melynek forrása a szintsűrűség formulából ered. A totális spektráeloszlás származtatásakor ui. fel kell használni a szintsűrűség explicit alakját és az ebben levő eltérések az erősségfüggvényben is megmutatkoznak [1].

Az erősségfüggvény kísérleti meghatározása főként ezzel a két módszerrel történik, habár vannak még további finomítások, amelyek egyes bizonytalanságokat kiküszöbölnek.

A fotogerjesztési módszer az egyetlen, amely az  $\tilde{f}$  erősségfüggvényt méri közvetlenül, ez azonban csak főleg a részecskeküszöb felett ad eredményeket. Ebben a tartományban ugyanis a  $(\gamma, n)$  reakció hatáskeresztmetszete,  $\bar{\sigma}_{\gamma n}$ , jó közelítéssel megegyezik a teljes abszorpciós hatáskeresztmetszettel  $\bar{\sigma}_{\gamma a}$ -val. Hasadó magoknál még a fotohasadás  $\bar{\sigma}_{\gamma f}$  hatáskeresztmetszetét is hozzá kell adni a  $(\gamma, n)$  reakció hatáskeresztmetszetéhez, hogy elegendő pontossággal megkapjuk az abszorpciós hatáskeresztmetszetet,  $\bar{\sigma}_{\gamma a} = \bar{\sigma}_{\gamma n} + \bar{\sigma}_{\gamma f}$ .

A második spektrumillesztési módszer az  $\tilde{f}$  erősségfüggvényt szolgáltatja, leginkább  $(d, p\gamma)$  és  $(n, \gamma)$  reakciókban alkalmazzák. Hátránya, hogy a  $Q(E)$  szintsűrűség felhasználásából adódó bizonytalanságon kívül még az erősségfüggvény abszolút értékét sem határozhatjuk meg teljes pontossággal, ugyanis az illesztés során a  $\bar{\Gamma}_{\gamma\psi(J)}^{(T)}$  meghatározásakor is felhasználjuk az illesztendő erősségfüggvényt, (I.36)-ban elvégezve az (I.37) közelítést és a  $\bar{\Gamma}_{\gamma\psi(J)}^{(T)}$  szélességet az illesztendő erősségfüggvényvel (II. 7—8) szerint kifejezve. Ez azt eredményezi, hogy a spektráeloszlásra, egy normálófaktor megváltoztatása az erősségfüggvényben, az eljárás során nem gyakorol hatást.

A kísérleti eredmények és a Lorentz-görbe összevetésénél figyelembe kell venni, hogy a fenti szisztematikus hibák az erősségfüggvényt egy 2—3-as faktoriall megváltoztathatják és ugyanez érvényes a Lorentz-görbe paramétereinek bizonytalanságából adódó eltérésekre is, amelyek szintén egészen egy 2-es faktorig terjedő eltérést



okozhatnak. Ezek alapján a kísérleti eredmények áttekintésénél mindig figyelembe kell venni, hogy az abszolút értékben mutatkozó eltérések nem teljesen mérvadók, a görbék alakjában levő eltérések azok, amelyek a lényegi és pontos információt tartalmazzák.

## IRODALOM

1. G. A. Bartholomew — *et. al.*, Advances in Nuclear Physics 7, 229, 1973.
2. A. M. Lane, Proc. Int. Conf. on Statistical Prop. of Nuclei Albany New York 1971. (Plenum 1972.) 271.
3. J. Zimányi, B. Gyarmati, Proc. Int. Symp. on Correlations in Nuclei, Balatonfüred, 1973. (OMKDK Budapest 1974.) 313.
4. A. M. Lane, Ann. Phys. 63, 171, 1971.
5. T. T. S. Kuo, J. Blomqvist, G. E. Brown, Phys. Lett. 31B, 93, 1970.
6. S. M. Perez, Phys. Lett. 33B, 317, 1970.
7. B. Buck, A. D. Hill, Nucl. Phys. A95, 271, 1967.
8. M. Marangoni, A. M. Saruis, Nucl. Phys. A132, 694, 1969.
9. S. A. Moszkowski, Proc. Int. Symp. on Correlations in Nuclei Balatonfüred, 1973. (OMKDK Budapest, 1974.) 5.
10. L. P. Csernai, J. Zimányi, Proc. Int. Symp. on Nuclear Structure Balatonfüred, 1975. (KFKI Budapest, 1976.) II. 259.
11. I. Bergqvist, Photon Strength Functions. Előadás IAEA Meeting (Trieste, 1975. dec. 8—12.)
12. J. M. Blatt, V. F. Weisskopf, Theoretical Nuclear Physics (Wiley, 1952.)
13. D. M. Brink, Doctoral Thesis, Oxford University 1955.
14. P. Axel, Phys. Rev. 126, 671, 1962.  
P. Axel, Proc. Int. Symp. on Nucl. Structure., Dubna, 1968. (IAEA, Vienna, 1968.) 899.
15. P. Axel, Phys. Lett. 4, 320, 1963.
16. J. D. Jackson, B. B. Kinsey, Phys. Rev. 82, 345, 1951.  
B. B. Kinsey, Beta- and gamma-ray spectroscopy (szerk.: K. Siegbahn) North Holland Amsterdam 1955.
17. G. A. Bartholomew, Proc. of Conf. on Electromagnetic lifetimes and properties of Nuclear states Gatlinburg 1961. (Nuclear Science Series Report No. 37. NAS—NRC Washington D. C. 1962.) 209.
18. I. Bergqvist, N. Starfelt, Nucl. Phys. 39, 353, 1962.
19. B. Lundberg, N. Starfelt, Nucl. Phys. 67, 311, 1965.
20. G. A. Bartholomew — *et. al.*, Can. J. Phys. 45, 2063, 1967.
21. G. A. Bartholomew — *et. al.*, Can. J. Phys. 45, 1517, 1967.
22. G. A. Bartholomew — *et. al.*, Can. J. Phys. 48, 687, 1970.
22. E. G. Fuller, E. Hayward, Nuclear Reactions (Szerk.: P. M. Endt és P. B. Smith) II. North Holland Amsterdam 1962. 405.  
H. Beil — *et. al.*, Nucl. Phys. A172, 426, 1971.  
G. P. Antropov — *et. al.*, Izvestija Akademii Nauk SZSZSZR. Szer. Fiz. 37, 2657, 1973.
23. P. Axel — *et. al.*, Phys. Rev. C2, 689, 1970.
24. E. J. Winhold — *et. al.*, Phys. Lett. 32B, 607, 1970.  
G. E. Brown, M. Bolsterli, Phys. Rev. Lett. 3, 472, 1959.
25. G. E. Brown, Unified theory of nuclear models (North Holland Amsterdam 1964.)
26. A. Bohr, B. R. Mottelson, Nuclear Structure Vol. 1. (W. A. Benjamin Inc. 1969.)
27. B. Gyarmati, A. M. Lane, J. Zimányi, Phys. Lett. 50B, 316, 1974.
28. A. M. Lane, Phys. Lett. 50B, 204, 1974.
29. M. K. Pal, J. M. Soper, A. P. Stamp, Harwell Report T. P. 148, 1964.
30. V. Gillet — *et. al.*, Nucl. Phys. 88, 321, 1966.
31. S. Devons, L. J. B. Goldfarb, Angular Correlations (Handbuch der Physik Bd. XLII).
32. S. A. Moszkowski, Alpha-, Beta-, and Gamma — Ray Spectroscopy (Szerk.: K. Siegbahn) North Holland, Amsterdam, 1965.) 863.
33. A. Gilbert, A. G. W. Cameron, Can J. Phys. 43, 1446, 1965.
34. N. Bohr, Nature 137, 344, 1936.
35. E. P. Wigner, Proc. Cambridge Phil. Soc. 47, 790, 1951.
36. L. P. Csernai, J. Zimányi, Collective threshold States KFKI preprint, KFKI—76—16. 1976.



# KÖNYVISMERTETÉS

S. Costa and C. Schaerf (ed.): *Photonuclear Reactions I., II.*  
International School on Electro — and Photonuclear Reactions,  
Erice, Italy, 1976.  
Springer-Verlag  
Berlin, Heidelberg, New York, 1977.

A legkevesébé sem kell csodálkoznunk azon, hogy a fotonukleáris reakcióknak (a fotonokkal kiváltott magreakcióknak) nyári iskolát szentelnek Ericében, és hogy ennek az iskolának az anyaga két vaskos kötetet tölt meg. Hiszen az elektromágneses kölcsönhatásnak különös jelentőséget ad az a tény, hogy jól ismerjük, tehát az elektromágneses szondákat eredményesen használhatjuk többek között a még ma is rejtélyes magerők által kormányzott atommag tulajdonságainak letapogatására.

Jelenleg is sok magfizikai laboratóriumban végeznek kísérleteket elektron- és foton-nyalábokkal és — mint ez a kiadvány második kötetéből kiderül — komoly erőfeszítéseket tesznek a mérési technika javítására. A második kötetben olvashatjuk többek között W. Bertozzi beszámolóját az MIT-ben, illetve C. De Vries cikkét az Amszterdamban folyó kísérleti munkáról. G. Matone Frascatiból, Ph. Calliton Saclayból, A. Richter Darmstadtból tudósít a legújabb fejleményekről.

A nagyszabású kísérleti munkához szükséges elméleti alapok áttekintését végzik el az első kötet szerzői. Nehéz dolguk van, mert a téma igen gazdag: a klasszikus óriás dipol rezonanciától a legújabb eredményekig, a fenomenologikus leírástól a mikroszkopikus modellekig, néhány MeV-től a GeV-es energia-tartományig terjed. Az óriás dipol rezonanciáról különösen alapos ismertetést ad R. Bergére. Kísérleti eredményekkel és ábrákkal bőségesen illusztrált cikkében valóban az elemekből kiindulva építi fel az óriás dipol rezonanciára vonatkozó tudnivalókat és fejezetenként kimerítő bibliográfiát közöl. Nemcsak a dipol rezonancia gerjesztési módjaival és modelljeivel foglalkozik, de külön fejezetet szentel a foton-források és nyalábok tulajdonságainak is. A dipol rezonanciát mindvégig az óriás rezonanciák családjá egy tagjaként kezeli, és ezzel előkészíti S. Hanna dolgozatát, aki általában foglalkozik az óriás multipol rezonanciákkal. Könnyű és nehéz magokban egyaránt részletesen áttekinti az izoskalár és izovektor M1 és E2 rezonanciákat. G. Ricco az óriás dipol rezonancia fölötti energiákon végbemenő fotonukleáris reakciókat vizsgálja, E. Hayward a foton-szórást tárgyalja az 5—30 MeV energiatartományban. W. Weisetől az összecsabályokról kapunk rendkívül hasznos összefoglalót, R. Leonardi pedig az óriás dipol rezonancia izospinszerkezetével foglalkozik. Meg kell még említeni C. Ciofi delgi Atti cikkét, aki úgy kívánja megoldani a magfizika „gordiuszi csomóját”, hogy alaposan szemügyre veszi a két- és háromrészecske rendszer elektromágneses kölcsönhatásait. Konklúzióban kénytelen megállapítani, hogy ehhez többek között a fotonukleáris reakciók területén is további erőfeszítésekre van szükség.

A kiadvány színvonala az ericei nyári iskola színvonalához illeszkedik: magas, de az alapoktól indul és logikus lépésekben halad. A könyv minden bizonnyal alkalmas arra, hogy gyakorló és kezdő fizikusok egyaránt sokat tanuljanak belőle.

Fái György

C. Gruber, A. Hintermann, D. Merlin: *Group Analysis of Classical Lattice Systems*  
Springer-Verlag, Berlin, 1977.

A könyv az elméleti szilárdtestfizikai kutatások egyik legizgalmasabb és legújabb ágával, a spin-hálók elméletével foglalkozik. Ez a kutatási irányzat csak néhány éve indult meg, ezért külön öröm kézbe venni egy olyan könyvet, amely már összegezi e téma eredményeit. A könyv a fizikai modell kidolgozásakor fellépő matematikai problémákat tárgyalja, ezek megértésébe segíti az olvasót. A monográfia három részre tagozódik, az első kettő a feles spinű hálóval, míg a harmadik rész tet-szőleges spinű (1-es) hálók leírásával foglalkozik. A szerzők a könyvükbe néhány jól megválasztott feladatot is ismertetnek, ezek segítségével az olvasó nyomon követheti az elmélet alkalmazását fizikai modellre.

Farkas István



**D. G. Provis, R. Radock: Waves on Water of Variable Depth**  
 (Lecture Notes in Physics, 64. kötet).  
 Australian Academy of Science, Canberra,  
 Springer-Verlag, Berlin—Heidelberg—New York, 1977.

A Lecture Notes in Physics 64. kötete az 1976 júliusában Canberrában tartott konferencia előadásainak az anyagát adja közre. A konferenciát a Nemzetközi Elméleti és Alkalmazott Mechanikai Egyesület (IUTAM) és az Ausztráliai Tudományos Akadémia támogatásával rendezték, mintegy 50 résztvevővel.

A dolgozatok témája — a folyadékhullámok tárgykörén belül — igen széleskörű: laboratóriumi kísérletek, közönséges gravitációs felületi hullámok, nagy hullámhosszúságú óceán-hullámok; a hullámegyenlet megoldása speciális peremfeltételekkel, nemlineáris hullámegyenletek egzakt megoldásai. Néhány dolgozat ugyan állandó mélységű (vagy végtelen mély) folyadékokban kialakuló hullámokkal foglalkozik, módszere azonban változó mélységű folyadékokra könnyen átalánosítható. Nagy figyelmet szenteltek a konferencia előadói a hullámgerjesztés mechanizmusának és a nemlineáris hullám — hullám-kölcsönhatásnak.

A kötet szerkesztői a dolgozatokat témájuk alapján fejezetekbe csoportosították. Nagyon megkönnyíti az áttekintést az egyes fejezetek elején olvasható, gondosan összeállított összefoglalás.

A kötetet — témájának specialitása ellenére — haszonnal forgathatják mindazok a fizikusok és mérnökök, akik a kontinuumokban terjedő hullámok elméleti vagy kísérleti vizsgálatával foglalkoznak.

*Szabó János*

**Maurice Holt: Numerical Methods in Fluid Dynamics.**  
 Springer Series in Computational Physics.  
 Springer-Verlag, Berlin—Heidelberg—New York, 1977.

Minthogy az áramlástani feladatok megoldása zárt alakban csak a legegyszerűbb esetekben adható meg, a hidrodinamika alkalmazásaival foglalkozó kutatók mindig különös érdeklődést tanúsítottak a differenciálegyenletek (különösen a nemlineáris differenciálegyenletek) numerikus megoldási módszerei, az e területen kidolgozott új matematikai módszerek iránt. Ez az érdeklődés különösen megnövekedett a számítógépek kapacitásának és működési sebességének megnövekedése óta: megszorodtak az ilyen témájú konferenciák, örömdetesen bővült (és tartalmukban mélyült) a numerikus módszerek hidrodinamikai alkalmazásaival foglalkozó szakkönyvek, monográfiák száma.

Maurice Holt könyve ennek ellenére hézagpótlónak mondható: mintaszerű ötvözte ugyanis az elméleti („tiszt”) és az alkalmazott matematikai fizikának.

A könyv első részének tárgyát gázdinamikai és nemlineáris hullámkölcsönhatással kapcsolatos feladatok képezik. A könyv második fele foglalkozik a sűrűlő folyadékok áramlástani feladatainak megoldási módszereivel. A fejezetcímek: Általános bevezető. A Godunov-féle sémák. A BVLR-módszer. A karakterisztikák módszere háromdimenziós gázdinamikai problémák megoldására. Integrál-módszer. A Telenin-féle módszer és a vonal-módszer.

A könyv egyes fejezeit tömör, de világos elméleti összefoglaló vezeti be, numerikus példák és szakirodalmi referenciák egészítik ki. Rendkívül hasznos a könyv végén található gépi program és a gondosan összeállított tárgymutató.

*Szabó János*

**R. M. A. Lieth, D. Reidel (edit.): Preparation and Crystal Growth of Materials**  
 with Layered Structures  
 Publishing Company Dordrecht-Holland, Boston — USA.

Jelen könyv első kötete a kiadó által megjelentetni tervezett Physics and Chemistry of Materials with Layered Structures című sorozatnak, amelyet neves nemzetközi szerkesztőgárda fémjelez. A könyv a legkülönbözőbb anyagfajták előállítását, egykristályainak növesztési lehetőségeit tárgyalja. Az anyagfajtákat egyetlen szempont sorolja egymás mellé, és pedig a réteges szerkezetük. Az egyes anyagcsaládokat szaktekintélyek áttekintő cikkek formájában tárgyalják gazdag irodalmi hivatkozással. Így J. G. Hooley az elemeket, J. Schoonman és R. M. A. Lieth a fémhalidokat,



H. R. Oswald és R. Asper a kétértékű fémhidroxidokat, R. M. A. Lieth és I. C. I. M. Tarhell az átmeneti fém dichalkogenideket, R. M. A. Lieth a III—VI vegyületeket és P. Buck a IV—VI vegyületeket tekinti át.

A réteges szerkezetű anyagok — amelyek között találunk fémeket, félvezetőket és szigetelőket egyaránt — közös jellemzője a nagy anizotrópia, amely különleges tulajdonságok kialakulását teszi lehetővé. Jóllehet ezen anyagok vizsgálata a kutatás előterében áll, sokszor nehéz feladatot jelent a nagyszámú politípiá és a fellépő rács hibák nagy sűrűsége miatt a szerkezet azonosítása, valamint a szerkezet és tulajdonság közötti összefüggések feltárása. Ezen anyagokra jellemző a könnyű hasadás. Az egyik dimenzióban laza kötés miatt tökéletes a hasadási felület, ezért jó kísérleti alanyai lehetnek a foto-elektron emissziós spektroszkópiának, valamint más felületi jelenségeket vizsgáló módszereknek.

Ez a kötet a tárgyalt anyagok előállításával, a különböző egykristálynövesztési módszerek alkalmazási lehetőségeivel foglalkozik, elsősorban a kristálynövesztő szakemberek érdeklődését felkeltve, ugyanakkor számos kristallográfiai és kémiai adatot is tartalmaz. A sorozat szerzői azonban a további kötetekben más szakemberek számára is több információt kívánnak nyújtani a réteges szerkezetű anyagokról, ezért a második kötetben a kristallográfiájuk és kristálykémiájuk, a továbbiakban pedig az elektron és fononszerkezetük, elektromos és optikai sajátosságuk kerülnek tárgyalásra. A kémia, fizika és technológia szakemberei egyaránt haszonnal forgathatják a könyvet és várakozással tekintenek a sorozat további kötetei elé.

Voszka Rudolf

V. Dobrev, G. Mack, V. B. Petkova, S. G. Petrova, I. T. Todorov:  
Harmonic Analysis on the  $n$ -Dimensional Lorentz Group and  
Its Application to Conformal Quantum Field Theory.

Lecture Notes in Physics, 63, Springer-Verlag, Berlin—Heydelberg—New York, 1977.

A kvantumtérelméleti eredmények (renormalizációs csoport vizsgálatok) azt mutatják, hogy az  $n$ -pont Green-függvények konform invariáns alakot öltenek a rövid távolságú határesetben. Ez szükségessé tette a konform invariáns kvantumtérelméleti modellek részletes vizsgálatát. A könyv szerzői, elsősorban G. Mack és I. T. Todorov sok értékes eredményt értek el a konform invariáns kvantumtérelméleti modellek nemperturbatív vizsgálatában.

Ezen munka megkövetelte az általánosított Lorentz-(vagy de Sitter) csoportok  $O(N, 1)$  reprezentációelméletének részletes vizsgálatát.

Az Euklideszi konform csoport  $2k$  tér-idő dimenzióra éppen  $O(2k+1, 1)$ . Eddig csak az  $O(2, 1)$ ,  $O(3, 1)$  és  $O(4, 1)$  csoportok reprezentációelméletét dolgozták ki az irodalomban részletesen. A konform invariáns kvantumtérelmélet részletes vizsgálata azonban megkövetelte a szerzőktől az  $O(N, 1)$  csoportok reprezentációinak részletes vizsgálatát tetszőleges  $k$ -ra. Ez a könyv első részének témája.

A szerzők kidolgozzák az  $O(N, 1)$  csoport ún. I. típusú reprezentációit (szimmetrikus tenzor reprezentációk) és a velük kapcsolatos, a fizikai alkalmazásokhoz szükséges mennyiségeket tanulmányozzák. Az eredményeket többnyire Harish—Chandra általános elméletéből vezetik le. A szerzők célja, hogy részletesebben megismertessék a fizikus olvasóval a nemkompakt csoportok reprezentációinak elméletét.

Az utóbbi években az elméleti fizikusok megpróbálták felhasználni a Gell—Mann—Low limitbeli kvantumtérelmélet konform invarianciáját néhány Yukawa típusú kölcsönhatás esetén arra, hogy nem perturbatív információt kapjanak a Green-függvényekre rövid távolságon. A könyv második részében az Euklideszi konform invariáns Green-függvényekre és a Wightman-függvényekre diszkrét kifejtést vezetnek le a szerzők, amely a vákuum operátorszorzat kifejtésének felel meg. Igazolják a 4-pont Wightman-függvényekre vonatkozó pozitivitási feltételt. Levezetik a tetszőleges  $n$ -pont Euklideszi vertex függvény teljes konform invariáns parciálishullám kifejtését.

A tárgyalást a Symanzik és Fradkin által levezetett csatolt nemlineáris integrálegenletekre alapozzák, amelyek megoldásai a  $2k$  dimenziós Euklideszi Green-függvények. A Gell—Mann—Low határesetbeli elmélet Green-függvényeit konform invariáns parciálishullám-sorba fejtik. A dinamikai egyenletek következményeképpen pólusok jelennek meg és a reziduumok faktorizálódnak, és a reprezentációs paraméterek függvényei lesznek.

Az ilyen típusú eljárás végső célja olyan konform invariáns kvantumtérelmélet definiálása, amely kielégíti:

- a) a megfelelő dinamikai egyenleteket (Dyson-egyenletszerű integrálegenletek);
- b) a Wightman (Osterwalder—Schrader) pozitivitást;
- c) a keresztezési szimmetriát.



Ezen módszer nehézsége, hogy expliciten meg kell konstruálni a modellt, amely a fenti feltételeket mind kielégíti. Azonban még a legegyszerűbb  $\lambda\varphi^3$  elmélet tárgyalása sem befejezett.

A könyv olvasása nem kíván különösebb matematikai előismereteket. Könnyen elsajátítható és követhető. Anyaga hézagpótló a matematikai-fizika irodalomban. Sok igen fontos és jelentős eredményt tartalmaz. Ezen sorozat célja a fizika kutatásában és tanításában elért eredmények bemutatása — gyorsan és magas szinten. Ezen könyv valóban új és fontos eredményeket tartalmaz. Sajnos a kézirat minősége néhol csak a „preprintek” minőségét üti meg, nem egyenletes, és így ez néhol az olvashatóság rovására megy.

(H. Z.)

**S. W. Lovesey és T. Springer (edit.):**  
**Dynamics of Solids and Liquids by Neutron Scattering**  
Springer-Verlag, 1977.

A Springer-kiadó kitűnő sorozatában (Topics in Current Physics) megjelent kötet a kondenzált rendszerek mikrodinamikájának vizsgálata területén elért legújabb eredményeket ismerteti, első sorban az új, nagy fluxusú reaktoroknál folyó rugalmatlan neutronszerzés kísérletek eredményeire támaszkodva. Az utóbbi években a neutronszerzés mérések apparatív háttere viharos fejlődésen ment át, ami szintén tükröződik a könyv tartalmában. Mivel a terület jelenleg is gyors fejlődésben van, a szerzők nem kísérelték meg annak teljes ismertetését, inkább a fejlődés szempontjából legfontosabb eredményeket tárgyalják.

A szilárd testek rácsdinamikájának vizsgálata rugalmatlan neutronszerzés segítségével már 20 éve élő kutatási irány. A szerzők ezen terület egyik legújabb problémakörét, a komplikált kristálytani szerkezetű anyagok rácsdinamikáját tárgyalják. A fázisátalakulások — ezen belül az ún. soft-módusok és a másodrendű átalakulások környezetében fellépő kritikus fluktuációk — ismertetése a legújabb eredményeken alapul. A könyv egy fejezete molekulakristályok és polimer anyagok dinamikájával, továbbá felületi jelenségekkel (adszorbeált anyagok) és kemisorbeált atomok ill. molekulák mozgásával foglalkozik. A molekulákon belüli mozgásokat (rotáció) és hidrogénnek fémekben való diffúzióját külön fejezet tárgyalja. A tematikát a klasszikus egyatomos folyadékokban fellépő kollektív mozgások és a mágneses kristályokban levő mágneses kollektív gerjesztések leírása teszi teljessé.

A könyv jól kiegészíti a témában eddig megjelent kiadványokat, és ezért hasznos információk forrása nemcsak a tárgyalt problémákban közvetlenül érintett kutatók, hanem a szilárdtestfizika legújabb eredményei iránt érdeklődő és annak alapkérdéseiben egyébként járatos olvasó számára.

(K. N.)

**Landolt Börnstein: Magnetische Eigenschaften freier Radikale.**  
**Atome, anorganische Radikale und Radikale in Metallkomplexen.**  
Teil a Neue Serie Gruppe II, Band 9, Springer-Verlag, 1977.

A mű az 1965-ben megjelent hasonló című II/1 kötet első kiegészítő kötete. 1978 végéig még két további kiegészítő kötet megjelenését irányozták elő. E három kötet az 1964—1975 időközben publikált irodalmi adatokat dolgozza fel.

A kötet  $^2\text{S}$  ill.  $^2\text{P}$  állapotban levő atomok és ionok, továbbá dublet állapotú molekulák és molekulaionok, gáz, folyadék, ill. szilárd fázisokban EPR, ESR, ENDOR, ELDOR, NMR, CIDNP, ODMR atomsugárspektroszkópia és optikai spektroszkópiai módszerek segítségével mért  $g$  és  $a$  (hiperfinom) tenzorait, ill. gázfázisban az előbbieknél megfelelő bonyolultabb mennyiségek számértékeit tartalmazza.

A kötetben szereplő atomokat, molekulákat, ill. ionokat két címszó alá sorolják. A „Szervetlen gyökök” címszó alatt tárgyalt gyököknél a „szervetlen” fogalmat kiterjeszti az egy szénatomot tartalmazó molekulákra is. Itt azonban bizonyos ligandumokat (pl.  $\text{CO}_2^-$  és  $\text{CN}^-$ ) per se szervetlennek tekint. A további rendszerezés alapja a prioritás sorrendjében: a centrális atom rendszáma, a ligandumok száma, összegezett atomi rendszáma, növekvő negatív töltése, elektronszerkezete. „Gyökök fémkomplexekben” címszó alatt olyan fémkomplexeket tárgyal, melyek ligandumai a fentiekben kívül szerves gyökök is lehetnek. Itt a további rendszerezés a prioritás sorrendjében: a fématom oszlopszáma a periodikus rendszerben, a fématom és atomi rendszáma, továbbá a ligandumoknál az előzőekben felsorolt szabályok.



Adott gyök esetében feltünteti a gyökképzés körülményeit, a mérésnél alkalmazott matrixokat vagy oldószereket, a mérési módszert és hőmérsékletet, a  $g$  és  $a$  értékeket és az irodalmi forrásokat. Összesen kb. 900 gyök mérési adatait közli, azonban egy gyöknél a mérés körülményeitől függően több adatot tüntet fel. Réz esetében pl. Cu-gáz, Cu/Ne-por,  $\text{Cu}^+/\text{NaCl}$ -kristály stb. összesen 14 esetet tárgyal.

A kötet általános tudományos jelentőségén felül elsősorban a molekulaszervezeti kérdésekben és a fent felsorolt mérésekben érdekelt szakemberek körében nagy érdeklődésre tarthat számot.

(R. K.)

**Landolt Börnstein: Magnetische Eigenschaften freier Radikale  
Teil b Neue Serie, Gruppe II, Band 9 Springer-Verlag.**

A mű az 1965-ben megjelent hasonló című II/1 kötet második kiegészítő kötete, és az 1964–1975 (részben 1977 eleje) időközben publikált irodalmi adatokat dolgozza fel.

A kötet dublet állapotú szabad gyökök gáz, folyadék, ill. szilárdfázisokban EPR, ESR, ENDOR, ELDOR, NMR, CIDNP, ODMR, atomsugárspektroszkópia és optikai spektroszkópiai módszerek segítségével mért  $g$ , ill. (hiperfinom) tenzorai számértékeit tartalmazza.

A kötetben szereplő szabad gyökök két címszó alatt szerepelnek. „Nemkonjugált szénvegyület-gyökök” címszó alatt kb. 700 lokalizált páratlan elektront tartalmazó gyök található. A további besorolás alapja a páratlan elektront hordozó atom szubsztituenseinek száma, utóbbiak aciklusos vagy ciklusos jellege, kémiai jellege, stb. „Konjugált  $\pi$ -elektronokat tartalmazó gyökök” címszó alatt kb. 800 delokalizált páratlan elektront tartalmazó vegyületet tárgyal. Itt a további besorolás alapja a  $\pi$ -elektronok száma.

Érdekességgént kiemelném, hogy a táblázatokban kb. 50 DNA pirimidin bázis vagy ezekhez közelálló vegyületből levezethető gyök adatai találhatók meg.

(R. K.)

**Landolt Börnstein: Dichten Binärer Wässriger Systeme und Wärmekapazitäten flüssiger Systeme.  
Neue Serie, Gruppe IV Band 1b. Springer-Verlag.**

A mű 207 oldal terjedelmű első része kb. 320 szerves és kb. 450 szervetlen vegyület binér vizes rendszerei sűrűségértékeit tartalmazza az összetétel és bizonyos esetekben a hőmérséklet függvényében, és így kiegészítő kötete a binér nemvizes rendszereket és a polimer rendszereket tárgyaló IV/a kötetnek, melynek bevezetésében található a tárgyalt kötetre vonatkozó definíciók is. A szervetlen vegyületeket alfabetikus sorrendben, a szerves vegyületeket pedig a Hill-szisztéma alapján rendszerezték. Egyes esetekben, nehézvízes oldatokra vonatkozó sűrűségadatok is szerepelnek.

A 128 oldal terjedelmű második rész biner, ill. terner rendszerek fajhő, ill. hőkapacitás adatait tartalmazza. A bevezetés jól összefoglalja az idevonatkozó elméleti ismereteket, definiálja a megfelelő fizikai mennyiségeket: a többleentalpiát, a parciális moláris fajhőt és a látszólagos moláris fajhőt. A lényegi részben 172 szervetlen—víz, 56 szerves—víz, 23 szervetlen—szerves, 8 szerves—szerves binér rendszer, továbbá 14 terner rendszer adatait találhatjuk meg a hőmérséklet, a koncentráció, ill. ritkábban mindkettő függvényében. Az utóbbi esetben az adatokat diagramokon ábrázolták.

Az első rész jól kiegészíti a 6. kiadás II/4. kötetét, míg a második rész átmenetet képvisel a keveredési hőadatokat tartalmazó IV/2 kötet felé.

(R. K.)

**V. I. Matkovitch (edit.): Boron and Refractory Borides  
Springer-Verlag.**

A könyv azon előadásokat tartalmazza, amelyek Tbiliszi-ben a hasonló című nemzetközi szimpóziumon hangzottak el.

A bór kémiája a modern anyagkutatás egyik legdinamikusabban fejlődő területe, ahol egy, a jelenlegihez hasonló igényességű mű megjelenése igen komoly érdeklődésre tarthat számot a szakemberek nagyon széles rétegében.



A könyv három fejezetre oszlik. 1. Elméleti megfontolások (10 előadás) 2. Preparáció és tulajdonságok (15 előadás) 3. Különleges alkalmazások (8 előadás). Az előadások elsősorban a bórvegyületek elektronszerkezetét, kristálykémiáját, kémiai tulajdonságait, fázisegyensúlyait, elektromos és mágneses tulajdonságait tárgyalják, azonban kitérnek az ipari alkalmazásokra is, mint például védőburkolatok, nukleáris reaktorok, bevonatok és műanyag vázanyagok.

Az előadások közül kiemelném G. V. Szamszonov és V. A. Kovenszkaja előadását, akik ragyogóan foglalták össze a bórvegyületek elektronszerkezetére vonatkozó eddigi, eléggé ellentmondásos eredményeket.

(R. K.)

**Lars Gårding: Encounter with Mathematics**  
Springer-Verlag, 1977.

A könyvet szerzője olyanoknak szánta, akiknek már vannak némi matematikai ismereteik első-éves főiskolai szinten. Kilenc terület: számelmélet, algebra, geometria és lineáris algebra, határérték, folytonosság és topológia, differenciál- és integrálszámítás, sorok konvergenciája és divergenciája, valószínűség-számítás és a matematika alkalmazása kerül természetesen rövid ismertetésre, kiindulva a történelmi előzményektől az alapok tárgyalásán át néhány probléma bemutatásáig. Az egyes fejezetek végén kiemelkedő tudósok munkájából idézett sorok és a tudós fényképe teszi vonzóvá az elvont témát. Így a 204. oldalon Riesz Frigyeszt láthatjuk teljes dékáni díszben. Aki az illető tárgykörből az ott leírtaknál többet kíván ismerni, megteheti az egyes fejezetek végén felsorolt irodalom alapján. Megjegyzem, hogy megfelelő hazai irodalom is alkalmas ehhez.

A könyv 11. fejezete a matematika gyakorlati oldalát mutatja be. A szerző szerint Archimedesz, bár az elméleti kutatás volt számára az érdekes, találmányai révén lett híres. Vajon igaz-e, hogy Archimedesz csak az elméleti eredményeire volt büszke? Csakugyan „haladó hagyomány” ez a matematikusoknál? Vagy talán csak egyesek helytelen beidegződése?

Akár így, akár úgy, a számolási technikának a 4500 év előtt feltalált helyértéktől az elektronikus számítógépekig tartó, a szerző általi rövid ismertetése arra mutat, hogy a matematika praktikus alkalmazása alapfeltétele az emberiség haladásának.

Akkor, amikor a hazai fizika oktatásnak mostoha gyermeke az akusztika, külön érdekessége Gårding könyvének, hogy a matematikai modell alkotására példának a magánhangzóképzést, a formások vázlatos matematikai modelljét veszi.

A könyv szellemét, tárgyalási módját, célját, „csevegő hangját” jól jellemzi az utolsó, a 13. fejezet tartalomjegyzéke: Három „életrajz” (a., matematikát megtanuló; b., matematikát, mint pl. egy mérnök, használó és c., matematikát művelő, kutató „életrajza”). A matematika pszichológiája. A matematika tanítása (hogyan reformálná meg egy hivatásos matematikus a matematika oktatását). Egy mese (hogyan érti meg mindenki a matematikát, ha konkrét a feladat).

(T. Gy.)

**F. Wille: Analysis**  
B. G. Teubner, Stuttgart, 1976.

A középiskolai matematikaanyag tanítása hazánkban is „forró” terület.

F. Wille több, mint 300 oldalas könyvecskéje a gimnáziumok számára, pontosabban az ott tanító tanároknak készült. Éppen a hazai problémák miatt érdekes olvasmány. Megvitatása, tanulmányozása, a hazai idevágó irodalommal való összehasonlítása feltétlenül hasznos lehet. Ajánlanám megkísérlni hazai matematikai szakkörökben tanítani belőle. A szerző egyik célkitűzése: nagyon kevés előismeretre kíván támaszkodni, felbátoríthatja a tanárt erre a lépésre. Biztos, hogy a hazai geometriai, valós számokra vonatkozó és egyes halmazelméleti alapfogalmak ismerete nem azonos volumenű, gondolom inkább több, mint az NSZK-beli. Ez tehát nem lehet probléma. A könyvecske másik célkitűzése az alkalmazások előtérbe való állítása. Ehhez kapcsolódik a felsőbb analízis fogalomalkotásának előkészítése, különösen a funkcióanalízis, pl. a Banach-féle fixpont-tétel tanítása érdekében.



Wille úgy gondolja, hogy tárgyalási módja feleletet tud adni a tanulóknak felmerülő olyan kérdésekre, mint: mire jök a matematikai fogalmak, tételek, a kapott eredmények, milyen további tételek következnek belőlük. A feleletadás érdekében kulcsproblémaként az egyenletek és egyenlet-rendszerek megoldását tekinti. Ebből kiindulva folyik a leképezési fogalom, a konvergenciafogalom stb. tárgyalása.

(T. Gy.)

**Siklós Tivadar (szerk.): A szilárdtestkutatás újabb eredményei. I. kötet  
Akadémiai Kiadó, Budapest**

A hazai természettudományos irodalmat figyelve az az érzésünk, hogy a magyar fizikusok publikálási készsége a nagyobb lélegzetű, az áttekinthető, a nem vagy nem egészen azonos kutatási területen dolgozó kutatók, vagy általában a természettudományok iránt érdeklődők számára készített művek tekintetében elég szerény. E hiányon kíván segíteni az időközben fiatalon elhunyt Pataki Györgytől, a fizikai tudományok doktora által elindított, a szilárdtestkutatással foglalkozó sorozat.

Az, hogy ezen a területen milyen „izgalmas”, a hazai és a külföldi tudományt, tehát egyáltalában nemcsak a szilárdtestfizikát előrevivő, eredmények, feladatok, lehetőségek vannak, az világossá válik mindenki előtt, ha az első, a *Pál Lénárd* akadémikus által „Újabb irányzatok a szilárdtestfizikában” címmel írt dolgozatot elolvassa. — Egyébként a cím megtévesztő, mert a dolgozat tárgyalja a múltat, részletezi a jelent, és kitűzi a jövő feladatait. A szerző élvezetes stílusa, óriási tárgy- és tudománypolitikai ismerete kitűnő indítást ad a sorozatnak.

A kötet második és harmadik dolgozata a hazai szilárdtestfizika másik nagy bázisában készült. Az első szerzőjének, *Bertóti Imrénék* kémikus volta visszautal Pál Lénárdnak arra a megállapítására, hogy a szilárdtestfizika más tudományterületekre is kihat. A téma: „Félvezetők epitaxiális növesztése folyadékfázisból” viszont Pál Lénárd azon megállapítását igazolja, hogy a kristálynövesztés a Gyulai iskola révén hazai alapokon továbbfejlődött nálunk. Úgy vélem, azért is helyes volt a bevezetőt ilyen témával folytatni, mert a szilárdtestkutatás alapfeltétele megfelelő kutatási „alanyok”, tehát adott „programozott” tulajdonsággal rendelkező szilárdtestek előállítására. Azt, hogy ez a feladat mennyire összetett, milyen buktatókat rejt magában, jól bemutatja Bertóti gondos, részletes ismertetése.

Ez a dolgozat más problémára is rámutat. Az általa ismertnek tekintett fogalmak, mint pl. a kristályhibák (ponthibák és diszlokációk) a kötet harmadik dolgozatában, *Pödör Bálint*: „Diszlokációk és elektromos tulajdonságaik félvezetőkben” című munkájában szerepelnek. Úgy vélem, hogy ez utóbbi dolgozatnak Bertótiéhoz való kapcsolása véletlen. Önálló mondanivalójának, a diszlokációk elektromos tulajdonságának ismertetése igényelte azt, hogy a szerző néhány, Bertótinál is előforduló alapfogalom tisztázásával kezdje.

Tehát fennmarad a probléma: kikhez szóljon ez a sorozat? A szilárdtestfizikusokhoz? Nyilván nem lehet csak ez a cél? A többi fizikushoz is? Talán ez is túl szűk kört jelentene. A többi rokon természettudományt vagy egyáltalában nem tudományt művelőhöz? Szerintem minden érdeklődő emberhez kell, hogy szóljon. Ez azonban bizonyos feltételek teljesítését igényli.

Úgy hallottam, hogy egyszer Babits-hoz beállított egy irodalmárnak készülő elkeseredett gimnazista, akinek keserűségét a számára feleslegesnek tűnő, de előírt természettudományi anyag okozta. Babits a panaszkodónak szó nélkül megmutatta azt a könyvet, amelynek olvasásában az illető egyén megzavarta: a felsőbb analízisről szólt. Úgy vélem, hogy a költő Babits csak olyan könyvet tanulmányozhatott, amely egy intelligens ember számára önmagában is érthető volt.

Olyan dolgozatokat vagy inkább olyan *szekesztési módot* ajánlanék, amely ennek a kitűnően induló sorozat számára ezt a teljességet biztosítja.

(T. Gy.)



S. Baffi és G. Passatore: Nuclear Optical Potential  
Springer-Verlag, 1977.

A Springer Kiadó a Lecture Notes in Physics sorozatának egyik legújabb kötete az 1976. április 8-án és 9-én Páviában tartott magfizikai konferencia előadásainak az anyagát tartalmazza. A konferencia egyetlen témája a magfizikában használt Optikai Potenciál volt.

A mag és egy bombázó nukleon kölcsönhatása általában igen bonyolult probléma. Ha azonban csak a rugalmas szórás iránt érdeklődünk, akkor lehet találni egy olyan egy-részecske potenciált, amely jól leírja a mennyiségi viszonyokat. Ez az ún. optikai potenciál egy komplex mennyiség, amely az energiának és a tömegszámnak lassan változó függvénye. Rendkívül kiterjedt kísérleti és elméleti kutatás folyt és folyik jelenleg is annak érdekében, hogy az optikai potenciálra olyan függvényalakot és olyan parametrizálási módszert találjanak, amely nemcsak a rugalmas szórási és az abszorpciós hatáskeresztmetszetet képes reprodukálni, hanem az egyrészecske rezonanciák helyét és szélességét is. Az optikai potenciál segítségével számított szórási hullámfüggvényt kiterjezetten használják a magreakciók leírásánál is, ezért külön gondot kell fordítani arra, hogy az optikai modell helyes szórási hullámfüggvényt produkáljon. A kutatások jelenlegi stádiumában a hangsúly egyre inkább arra a feladatra toódik el, hogy hogyan lehet a fenomenologikus optikai potenciált leszármaztatni a magok mikroszkopikus (sok részecskés) elméletéből. A konferencia előadói között szerepeltek a magfizika olyan jeles képviselői is, mint Peter Hodgson és Claude Mahaux, akik szoros kapcsolatokat tartanak fenn a magyarországi magfizikai kutatásokkal is.

(L. I.)

MAGYAR  
TUDOMÁNYOS AKADEMIA  
KÖNYVTÁRA

MTA Könyvtára / 1973  
Periodika 1978. .... m



Technikai szerkesztő Turchányi György  
A kiadásért felelős az Akadémiai Kiadó igazgatója — Műszaki szerkesztő: Salgó István  
A kézirat beérkezett: 1977. IX. 26. — Terjedelem: 7,7 (A/5) ív  
77-4226 — Szegedi Nyomda — F. v.: Dobó József







A MAGYAR  
TUDOMÁNYOS AKADÉMIA  
MATEMATIKAI ÉS FIZIKAI TUDOMÁNYOK  
OSZTÁLYÁNAK

# KÖZLEMÉNYEI

Matematikai, fizikai, csillagászati dolgozatokat, referátumokat, könyvismertetéseket, a Tudományos Minősítő Bizottságnak a III. Osztályra vonatkozó híreit s a III. Osztály híreit közli. Évenként egy kötet (kb. 40 ív) jelenik meg (négy szám alkot egy kötetet).

A Közlemények előfizetési ára kötetenként, azaz évenként 60 Ft. Belföldi megrendelések az Akadémiai Kiadó, 1363 Budapest V., Alkotmány u. 21. (pénzforgalmi jelzőszámunk 215-11 488), külföldi megrendelések a „Kultúra”

Könyv- és Hírlap Külkereskedelmi Vállalat,

1011 Budapest I., Fő utca 32.

(pénzforgalmi jelzőszám: 218-10 990) útján eszközölhetők.



## TARTALOMJEGYZÉK

<i>Szabó András</i> : A bioszféra radioaktív szennyeződését befolyásoló egyes tényezők vizsgálata ..	445
<i>Csernai László</i> : Küszöbállapotok hatása az elektromágneses átmenetekre .....	473

## KÖNYVISMERTETÉS

<i>S. Costa—C. Schaerf</i> : Photonuclear Reactions I. II. (Fái György) .....	523
<i>C. Gruber, A. Hintermann, D. Merlin</i> : Group Analysis of Classical Lattice Systems (Farkas István) ..	523
<i>D. G. Provis, R. Radock</i> : Waves on Water of Variable Depth ( <i>Szabó János</i> ) .....	524
<i>Maurice Holt</i> : Numerical Methods in Fluid Dynamics ( <i>Szabó János</i> ) .....	524
<i>R. M. A. Lieth, D. Reidel</i> (edit.): Preparation and Crystal Growth of 42E Materials with Layered Structures ( <i>Voszka Rudolf</i> ) .....	524
<i>V. Dobrev, G. Mack, V. B. Petkova, I. T. Todorov</i> : Harmonic Analysis on the $n$ -Dimensional Lorentz Group and Its Application to Conformal Quantum Field Theory ( <i>H. Z.</i> ) .....	525
<i>S. W. Lovesey és T. Springer</i> (edit.): Dynamic of Solids and Liquids by Neutron Scattering ( <i>K. N.</i> ) ..	526
<i>Landolt Börnstein</i> : Magnetische Eigenschaften freier Radikale. Atome, anorganische Radikale und Radikale in Metallkomplexen ( <i>R. K.</i> ) .....	526
<i>Landolt Börnstein</i> : Dichten Binären Wässriger Systeme und Wärmekapazitäten flüssiger Systeme ( <i>R. K.</i> ) .....	527
<i>V. I. Matkovitch</i> (edit.): Boron and Refractory Borides ( <i>R. K.</i> ) .....	527
<i>Lars Gårding</i> : Encounter with Mathematics ( <i>T. Gy.</i> ) .....	528
<i>F. Wille</i> : Analysis ( <i>T. Gy.</i> ) .....	528
<i>Siklós Tivadar</i> (szerk.): A szilárdtestkutatás újabb eredményei. I. kötet ( <i>T. Gy.</i> ) .....	529
<i>S. Baffi and G. Passatore</i> : Nuclear Optical Potencial ( <i>L. I.</i> ) .....	530

1828—1978

MEGJELENT AZ AKADÉMIAI KÖNYVKIADÁS 150. ÉVÉBEN



## A MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT XXV. KÖTETÉHEZ

### TÁRGYMUTATÓ

<i>Bergou János</i> : Fényszórás kétatomos molekulákon .....	1
<i>Tarján Imre</i> : Nagytisztaságú alkali-halogenid egykristályok előállítása és tulajdonságai .....	41
<i>Forgács Gábor</i> : Kritikus jelenségek és a multiplikatív renormalizációs csoport .....	51
<i>Tóth Árpád</i> : A lakószobák levegőjében várható radon-, valamint toron-koncentráció becslése és a számított értékek kísérletes ellenőrzése .....	95
<i>Tóth Árpád</i> : Lakószobákban várható gammadózis-intenzitás becslése és a számított adatok kísérletes ellenőrzése .....	105
<i>Kovács István</i> : Felületcentrált köbös fémek alakítási keményedése .....	113
<i>Takács Csaba</i> : Kontinuum impulzusmérlegének korrekciója az Ott-féle transzformáció alapján .....	175
<i>Vincze Gyula</i> : Hozzászólás Nagy Károly „Variációs elvek a fizikában” című cikkéhez .....	193
<i>Valkó János</i> : A pulzált neutronforrás segítségével történő reaktivitás meghatározás néhány módszerének vizsgálata .....	199
<i>Csoma Zsigmond</i> : Egyenletes tömegeloszlású tér metrikájának előállítása téregyenletek nélkül ..	271
<i>Balogh Gy. Ádám</i> : Pozitron annihiláció ionkristályokban .....	285
<i>Holczer Károly</i> : Szerves kvázi egydimenziós anyagok mikrohullámú vezetőképességének és di-elektromos tényezőjének vizsgálata .....	341
<i>Takács Csaba</i> : Transzportfolyamatok leírása a relativisztikus kontinuumfizikában .....	379
<i>Szabó András</i> : A bioszféra radioaktív szennyeződését befolyásoló egyes tényezők vizsgálata ..	445
<i>Csernai László</i> : Küszöbállapotok hatása az elektromágneses átmenetekre .....	473

### A KLASSZIKUS IRODALOMBÓL

<i>R. Penrose</i> : Twistor-algebra .....	405
---	-----

### KÖNYVISMERTETÉSEK

<i>P. Bradshaw</i> (szerk.): Turbulence .....	185
<i>J. Brey—R. B. Jones</i> (szerkesztők): Critical Phenomena .....	185
<i>W. Nörenberg, H. A. Weidenmüller</i> : Introduction to the Theory of Heavy-ion Collisions .....	186
<i>H. Cabannes</i> (szerk.): Padé Aproximants Method and Its Applications to Mechanics .....	186
<i>G. Falk, W. Ruppel</i> : Energie und Entropie .....	187
<i>R. Beck, W. Englisch, K. Gürs</i> : Table of Laser Lines in Gases and Vapors .....	187
Interplanetary Dust and Zodiacal Light .....	188
<i>A. Janner, T. Janssen, M. Boon</i> : Group Theoretical Methods in Physics .....	189
<i>D. J. Simms, N. M. J. Woodhouse</i> : Lecture on Geometric Quantization .....	189
<i>I. G. Körner, G. Kramer, D. Schildknecht</i> (edit): Current Induced Reactions .....	189
Strukturdaten feier mehratomiger Molekeln Landolt—Börnstein Neue Serie .....	190
<i>M. Mladjenovic</i> : Development of Magnetic Beta-Ray Spectroscopy .....	190
<i>K. Shimoda</i> (ed.): High-Resolution Laser Spectroscopy .....	191
<i>A. I. van de Vooren, P. J. Zandbergen</i> (edit.): Proceedings of the Fifth International Conference on Numerical Methods in Fluid Dynamics .....	191
<i>A. Mooradian—T. Jaeger—P. Stokseth</i> : Tunable Lasers and Applications .....	192
<i>L. B. Felsen</i> : Transient Electromagnetic Fields .....	275



<i>R. Glowinski, J. L. Lions: Computing Methods in Applied Sciences</i> .....	275
<i>Landolt—Börnstein: Gleichgewicht der Absorption von Gasen in Flüssigkeiten; Absorption in Flüssigkeiten von niedrigem Dampfdruck</i> .....	276
<i>A. W. Thomas (editor): Modern Three—Hadron Physics</i> .....	276
<i>E. D. Hinkley (ed.): Laser Monitoring of the Atmosphere</i> .....	277
<i>A. Rosenfeld (eds.): Digital Picture Analysis</i> .....	277
<i>M. Ueta és Y. Nishina: Physics of Highly Excited States in Solids</i> .....	279
<i>F. K. Fong (ed.): Radiationless Processes in Molecules and Condensed Phases</i> .....	279
<i>S. Bashkin (ed.): Beam foil Spectroscopy</i> .....	279
<i>J. Kessler: Polarized Electrons</i> .....	280
<i>D. Kamke—K. Krämer: Physikalische Grundlagen der Masseinheiten</i> .....	280
<i>F. Kasch: Moduln und Ringe</i> .....	281
<i>W. Velté: Direkte Methoden der Variationsrechnung</i> .....	281
<i>J. Weidmann: Lineare Operatoren in Hilberträumen</i> .....	281
<i>D. Kaletsch: Programmierung mit P1/1</i> .....	282
<i>J. J. Benedetto: Real Variable and Integration</i> .....	282
<i>M. Mehring: High Resolution NMR Spectroscopy in Solids</i> .....	282
<i>Miklós Kocsis: High-speed Silicon Planarepitaxial Switching Diodes</i> .....	283
<i>Sohár Pál: Mágneses magrezonancia-spektroszkópia</i> .....	283
<i>L. Pál—P. Szépfalussy (editors): Statistical Physics</i> .....	284
<i>E. Koechner: Solid State Laser Engineering</i> .....	443
<i>J. Schnakenberg: Thermodynamic Network Analysis of Biological System</i> .....	443
<i>S. Costa—C. Schaerf: Photonuclear Reactions I., II. (Fái György)</i> .....	523
<i>C. Gruber, A. Hintermann, D. Merlin: Group Analysis of Classical Lattice Systems (Farkas István)</i> .....	523
<i>D. G. Provis, R. Radock: Waves on Water of Variable Depth (Szabó János)</i> .....	524
<i>Maurice Holt: Numerical Methods in Fluid Dynamics (Szabó János)</i> .....	524
<i>R. M. A. Lieth, D. Reidel (edit.): Preparation and Crystal Growth of 42E Materials with Layered Structures (Voszka Rudolf)</i> .....	524
<i>V. Dobrev, G. Mack, V. B. Petkova, I. T. Todorov: Harmonic Analysis on the <math>n</math>-Dimensional Lorentz Group and Its Application to Conformal Quantum Field Theory (H. Z.)</i> .....	525
<i>S. W. Lovesey és T. Springer (edit.): Dynamic of Solids and Liquids by Neutron Scattering (K. N.)</i> .....	526
<i>Landolt—Börnstein: Magnetische Eigenschaften freier Radikale. Atome, anorganische Radikale und Radikale in Metallkomplexen (R. K.)</i> .....	526
<i>Landolt—Börnstein: Dichten Binären Wässrigen Systeme und Wärmekapazitäten flüssiger Systeme (R. K.)</i> .....	527
<i>V. I. Matkovitch (edit.): Boron and Refractory Borides (R. K.)</i> .....	527
<i>Lars Gårding: Encounter with Mathematics (T. Gy.)</i> .....	528
<i>F. Wille: Analysis (T. Gy.)</i> .....	528
<i>Siklós Tivadar (szerk.): A szilárdtestkutatás újabb eredményei. I. kötet (T. Gy.)</i> .....	529
<i>S. Baffi and G. Passatore: Nuclear Optical Potencial (L. I.)</i> .....	530



## A MAGYAR FIZIKAI FOLYÓIRAT XXV. KÖTETÉHEZ

### NÉVMUTATÓ

<i>Balogh Gy. Ádám:</i> Pozitron annihiláció ionkristályokban .....	285
<i>Bergou János:</i> Fényszórás kétatomos molekulákon .....	1
<i>Csernai László:</i> Küszöbállapotok hatása az elektromágneses átmenetekre .....	473
<i>Csoma Zsigmond:</i> Egyenletes tömegeloszlású tér metrikájának előállítása téregyenletek nélkül .....	271
<i>Forgács Gábor:</i> Kritikus jelenségek és a multiplikatív renormalizációs csoport .....	51
<i>Holczer Károly:</i> Szerves kvázi egydimenziós anyagok mikrohullámú vezetőképeségének és dielektromos tényezőjének vizsgálata .....	341
<i>Kovács István:</i> Felületcentrált köbös fémek alakítási keményedése .....	113
<i>Szabó András:</i> A bioszféra radioaktív szennyeződését befolyásoló egyes tényezők vizsgálata .....	445
<i>Takács Csaba:</i> Kontinuum impulzusmérlegének korrekciója az Ott-féle transzformáció alapján .....	175
<i>Takács Csaba:</i> Transzportfolyamatok leírása a relativisztikus kontinuumfizikában .....	379
<i>Tarján Imre:</i> Nagytisztaságú alkali-halogenid egykristályok előállítása és tulajdonságai .....	41
<i>Tóth Árpád:</i> A lakószobák levegőjében várható radon-, valamint toron-koncentráció becslése és a számított értékek kísérletes ellenőrzése .....	95
<i>Tóth Árpád:</i> Lakószobákban várható gammadózis-intenzitás becslése és a számított adatok kísérletes ellenőrzése .....	105
<i>Valkó János:</i> A pulzált neutronforrás segítségével történő reaktivitás meghatározás néhány módszerének vizsgálata .....	199
<i>Vincze Gyula:</i> Hozzászólás Nagy Károly „Variációs elvek a fizikában” című cikkéhez .....	193



